

Thèse présentée pour l'obtention du grade de

DOCTEUR DE L'ECOLE POLYTECHNIQUE

Spécialité : Mécanique et Matériaux

par

Nicolas RUPIN

Sujet de thèse

**Déformation à chaud de métaux biphasés :
modélisations théoriques et confrontations expérimentales**

soutenue le 19 octobre 2007 devant le jury composé de :

<i>Président</i>	Marcel BERVEILLER
<i>Rapporteurs</i>	Frank MONTHEILLET Olivier CASTELNAU
<i>Examineurs</i>	Pierre GILORMINI Christophe PINNA
<i>Directeur de thèse</i>	Michel BORNERT

Remerciements

Je commencerai ici par exprimer ma reconnaissance à Bernard Halphen, directeur du LMS, pour son accueil et pour m'avoir offert un environnement propice à l'émulation.

Il me faut également remercier les membres du jury qui ont examiné avec soin ce travail. En particulier, Olivier Castelnau et Frank Montheillet pour leurs remarques attentives et pour avoir accepté la lourde tâche de rapporter ce travail, ainsi que Marcel Berveiller pour m'avoir fait l'honneur de présider cette soutenance.

Lorsque j'ai suivi l'enseignement du DEA "Mécanique et Matériaux", j'ai été particulièrement sensible au cours de "mécanique des matériaux hétérogènes" proposé par Michel Bornert et Pierre Gilormini du fait de la portée de la thématique, de la clarté du formalisme utilisé et de la description statistique des matériaux qui y était développée. Cet engouement doit sans doute beaucoup aux enseignants et c'est avec grand plaisir que j'ai pu les retrouver en tant qu'encadrants de thèse.

Michel Bornert qui a dirigé ce travail m'a beaucoup apporté durant cette période. La rigueur de son analyse de problématiques aussi bien théoriques qu'expérimentales constitue pour moi un modèle que je m'efforcerai de suivre. Il a de plus fait l'effort d'être très présent au cours de ce travail et ce malgré les contraintes temporelles liées à ses très nombreuses activités, je lui en suis donc d'autant plus reconnaissant. Pierre Gilormini m'a également beaucoup épaulé et son indéfectible bonne humeur m'a aidé à traverser les moments de doute inévitables au cours d'une thèse. J'ai également pu bénéficier des conseils et du point de vue précieux d'André Zaoui qui m'a permis d'avoir un avis plus extérieur sur le travail réalisé.

Concernant la réalisation et le dépouillement des données expérimentales à haute température, j'ai pu compter sur la présence de Christophe Pinna qui m'a toujours accueilli chaleureusement lors de mes visites à l'université de Sheffield. J'ai également pu profiter au LMS de l'expertise de Daniel Caldemaison et de Jérôme Crépin qui m'ont beaucoup appris sur les techniques d'observation et de préparation et avec qui j'ai eu le plaisir d'avoir de nombreuses conversations enrichissantes.

Durant ces années j'ai également pu disposer des savoirs et des savoirs-faire de nombreux chercheurs permanents du LMS, je souhaite ici les remercier collectivement pour avoir toujours cherché à répondre au mieux à mes interrogations. Ces trois années de thèse auraient sans doute été moins agréables sans la présence de mes camarades doctorants de qui j'ai beaucoup appris. Un grand merci donc à Michel, José, Yannick, Ionut, Fabien, Kerem, Aude, Eva, Amna, Vincent, Arnaud, Marie, Damien, Oscar, Martin, Kostas, Stéphanie, Alexandre, Cécile, Vikranth, Aurélie, Céline, Gwenael, Yohan et Pierre je leur souhaite une grande réussite pour la suite de leur parcours.

Enfin, je souhaiterais remercier avec insistance les personnes que j'ai côtoyées hors du laboratoire, qu'ils soient des amis de longue date toujours présents en cas de besoin comme Benjamin Fournier et Julien Mifsud ou des membres de la famille toujours encourageants comme, Catherine, ma mère, mon frère Benjamin et bien sûr mes grands-parents Michel, Yvette et Gisèle...

Je tiens en particulier à rendre hommage à la patience et à la compréhension de Fabienne qui m'a constamment encouragé durant cette période et qui m'a toujours apporté un grand réconfort.

Table des matières

1	Comportement des aciers austéno-ferritiques	11
1.1	Intérêt des aciers inoxydables austéno-ferritiques	12
1.1.1	Composition et cristallographie	12
1.1.2	Caractéristiques mécaniques	13
1.2	Intérêt du laminage intercritique	15
1.3	Physique du comportement à chaud	16
1.3.1	Ecrouissage	16
1.3.2	Mécanismes d'adoucissement	17
1.3.3	Effet de la vitesse et de la température	18
1.3.4	Essais de caractérisation	19
1.4	Cas des aciers austéno-ferritiques	19
1.4.1	Aciers ferritiques	20
1.4.2	Aciers austénitiques	21
1.4.3	Aciers biphasés	21
1.4.4	Evolution et influence de la microstructure	25
1.5	Questions ouvertes	26
1.6	Modèles utilisés pour la description de l'écoulement des polycristaux	28
1.6.1	Modèles empiriques macroscopiques	28
1.6.2	Traitement micro-mécanique d'un problème	30
1.6.3	Prise en compte de la physique du matériau	30
1.7	Objectifs de l'étude et plan du travail	33
2	Introduction à l'homogénéisation des polycristaux viscoplastiques	35
2.1	Description générale de l'homogénéisation	36
2.1.1	Représentation statistique des matériaux hétérogènes	36
2.1.1.a	Elément microstructural représentatif	37
2.1.1.b	Macro-homogénéité	37
2.1.1.c	Fonctions de corrélation à p -points d'appuis	38
2.1.2	Passage d'une échelle à une autre	41
2.1.2.a	Définition intuitive des champs macroscopiques	41
2.1.2.b	Méthode de localisation : calcul de microstructures	42
2.1.3	Formulations "ad hoc"	46
2.1.4	Approches variationnelles	46
2.1.4.a	Formulation classique	47
2.1.4.b	Formulation de Hashin et Shtrikman	47
2.2	Cas des polycristaux viscoplastiques	50
2.2.1	Représentation et cinématique	50
2.2.2	Traitement du problème d'homogénéisation non linéaire instantané	55
2.2.2.a	Modèle statique et modèle de type Taylor	56
2.2.2.b	Modèle incrémental de Hill et modèle sécant	56
2.2.2.c	Modèles tangent et affine	59
2.2.2.d	Formulation variationnelle de Talbot et Willis	60
2.2.2.e	Formulation variationnelle de Ponte Castañeda	60
2.2.2.f	Modèles au second ordre	62
2.2.2.g	Informations sur les champs mécaniques	63

3	Modélisation variationnelle de l'écoulement d'un polycristal multiphasé	67
3.1	Description morphologique d'un polycristal biphasé	68
3.1.1	Méthode de redéfinition des phases	68
3.1.2	Autre description de la microstructure biphasée	69
3.1.2.a	Macro-homogénéité et formulation variationnelle à deux transitions d'échelles	71
3.1.2.b	Remarques et hypothèses	72
3.1.3	Choix de la méthode d'homogénéisation linéaire	72
3.2	Formulation instantanée	73
3.2.1	Linéarisation du monocristal	73
3.2.1.a	Formulation scalaire de deBotton et Ponte Castañeda	74
3.2.1.b	Formulation tensorielle de Ponte Castañeda et Suquet	75
3.2.2	Homogénéisation du polycristal	77
3.2.2.a	Forme à une transition d'échelle	77
3.2.2.b	Forme à deux transitions d'échelle	78
3.3	Détails liés au comportement en loi puissance	81
3.3.1	Calcul de $v_{(k)}^{(r)}$	81
3.3.2	Simplification pour des $n_{(k)}^{(r)}$ identiques	81
3.4	Méthode de minimisation de la fonctionnelle	82
3.4.1	Calcul du gradient de la fonctionnelle à minimiser	84
3.4.2	Méthode de calcul des seconds moments	86
3.4.2.a	Modèle à une transition d'échelle	87
3.4.2.b	Modèles à deux transitions d'échelle	88
3.5	Evolution microstructurale	89
3.5.1	Texture cristallographique	89
3.5.2	Texture morphologique	91
3.5.2.a	Evolution homogène dans le cas à une transition d'échelle	91
3.5.2.b	Prolongement dans le cas à deux transitions d'échelle	92
4	Validations et premiers résultats sur des matériaux modèles	95
4.1	Validation du modèle	97
4.1.1	Comparaisons dans le cas monophasé linéaire	97
4.1.2	Comparaisons dans le cas biphasé linéaire	100
4.1.3	Comparaisons dans le cas monophasé non linéaire	103
4.2	Effets morphologiques dans les polycristaux biphasés non linéaires	105
4.2.1	Caractérisation instantanée	105
4.2.2	Evolution du matériau	114
4.2.3	Influence de la morphologie sur l'évolution mécanique du matériau	118
5	Quelques caractérisations expérimentales des matériaux étudiés	121
5.0	Cadre du travail	122
5.1	Elaboration et exemples de caractérisations microstructurales	123
5.1.1	Elaboration des matériaux	124
5.1.2	Exemple de caractérisation chimique et microstructurale	125
5.1.2.a	Préparation du matériau	125
5.1.2.b	Analyse morphologique et cristallographique	127
5.1.2.c	Composition chimique des phases	135
5.1.3	Bilan	135
5.2	Comportement macroscopique et évolution microstructurale	137
5.2.1	Essai de bipoinçonnement	137
5.2.2	Corrections appliquées	138
5.2.3	Résultats pour les phases pures	139
5.2.3.a	Identification des exposants viscoplastiques	140
5.2.4	Résultats dans le cas biphasé	141
5.2.4.a	Comportement macroscopique	141
5.2.4.b	Evolution de la microstructure	143
5.3	Estimation des champs de déformation locaux	146

5.3.1	Principe de la micro-extensométrie	146
5.3.2	Méthode expérimentale	151
5.3.2.a	Montage	151
5.3.2.b	Préparation de surface	152
5.3.3	Mesures pour deux microstructures	155
5.3.4	Bilan	162
6	Application aux matériaux réels	163
6.1	Modélisation de l'écroissage	164
6.1.1	Modèle isotrope	164
6.1.2	Modèle anisotrope	165
6.1.3	Modèle basé sur les seconds moments	166
6.2	Identification des paramètres d'écroissage	167
6.3	Comparaisons modèle/expérience à l'aide des paramètres identifiés	169
6.3.1	Comparaison des écoulements macroscopiques	170
6.3.1.a	Modélisation auto-cohérente classique	170
6.3.1.b	Utilisation des modèles à deux transitions d'échelles	171
6.3.2	Analyse des écoulements locaux	177
6.3.2.a	Cas du matériau industriel I	177
6.3.2.b	Cas du matériau modèle D	179
6.3.2.c	Information statistique d'ordre supérieur	184
6.3.3	Prévision de l'évolution morphologique	189
6.3.3.a	Prévision de textures	189
6.3.3.b	Symétrie de répartition des phases	190
6.4	Influence de la texture ou de la microstructure initiale	191
6.5	Influence de l'écroissage et du contraste interphase	193
7	Extensions et discussion	197
7.1	Modélisations alternatives	198
7.1.1	Mise en œuvre	200
7.1.2	Formulations dérivées	202
7.1.3	Quelques résultats	203
7.2	Prise en compte d'un autre mécanisme de déformation	209
7.2.1	Méthode de quantification du glissement interphase	211
7.2.2	Application au matériau modèle	213
7.2.3	Automatisation de la procédure	215
7.3	Critique et prolongement de l'étude	220
7.3.1	Cadre théorique	220
7.3.2	Cadre expérimental	222
A	Quelques résultats simples concernant les polycristaux cubiques linéaires	225
A.1	Quelques solutions analytiques	225
A.1.1	Polycristaux monophasés	226
A.1.2	Polycristaux biphasés	227
A.2	Nullité de la rotation plastique	230
B	Quelques propriétés de la transformée de Legendre-Fenchel	233
B.1	Présentation	233
B.2	Transformée d'une somme de fonctions convexes	234

Introduction

L'objet de cette thèse est la compréhension et la prévision du comportement des polycristaux composés de deux phases. La spécificité de ce problème est liée à la microstructure du matériau. Celle-ci est à la fois constituée de plusieurs phases cristallographiques (allotropiques) distinctes (le matériau est en ce sens un matériau composite) et de cristaux présentant un grand nombre de formes et d'orientations, ce qui est classique dans le cas d'un matériau polycristallin. C'est avec l'idée que cette double source d'hétérogénéité doit avoir une influence sur le comportement, à l'échelle macroscopique mais aussi aux échelles plus fines, que nous avons abordé les problèmes de mise en forme rencontrés dans le cas d'un acier austéno-ferritique.

L'enjeu de ce travail est de construire un modèle visant à reproduire les phénomènes observés lors de caractérisations expérimentales du matériau. L'hétérogénéité du matériau, la complexité de sa microstructure et l'aspect non déterministe attaché à sa description nous ont conduit à utiliser des modèles d'homogénéisation pour aborder ce problème. Le premier objectif fixé fut donc de faire la revue des caractéristiques du matériau d'étude et des méthodes d'homogénéisation existantes qui peuvent nous aider à le modéliser ; c'est l'objet des deux premiers chapitres de ce travail.

A l'issue de cette synthèse bibliographique, nous nous interrogerons sur les spécificités de la description morphologique de ces polycristaux biphasés. L'absence de modèle permettant de caractériser l'influence de la répartition des phases sur le comportement mécanique d'un tel matériau nous conduira à proposer un nouveau modèle qui sera présenté au chapitre 3.

Cette nouvelle description étant posée, il nous faudra évaluer ses capacités à produire des effets liés à la distribution des phases et caractériser leurs conditions d'apparition. Afin d'obtenir ces informations, nous considérerons au chapitre 4 des situations tests principalement axées sur l'importance de certains paramètres tels le contraste interphase, la non linéarité et la fraction volumique. Ce chapitre sera également l'occasion de vérifier l'implémentation du modèle en confrontant les résultats obtenus, dans des cas simples, avec certains résultats issus de la littérature ou fournis par des logiciels à notre disposition.

Après avoir considéré ces situations de référence nous chercherons à nous rapprocher du matériau d'étude. Pour ce faire, nous proposerons des mesures expérimentales permettant d'obtenir des caractérisations directement utilisables dans le cadre du modèle précédemment introduit. Ces résultats expérimentaux, obtenus en collaboration avec l'université de Sheffield, constitueront des données de référence que nous chercherons à reproduire dans la suite du travail.

Le chapitre 6 propose de telles comparaisons modèle/expérience intégrant l'évolution microstructurale qui apparaît au cours de la sollicitation. Dans cette partie, ainsi que dans celle qui suit, nous discuterons des résultats obtenus, des défauts de nos modélisations et de nos caractérisations expérimentales, afin de pouvoir conclure quant à la pertinence de notre approche.

L'ensemble de ce travail se place dans le cadre des comportements non linéaires, il sera donc question de linéarisation dans ce mémoire, néanmoins ce n'est pas sur cet aspect que se situent, à proprement parler, les développements nouveaux. En effet, une autre étape critique du traitement d'un polycristal biphasé, qui est d'ailleurs fondamentale pour tous les matériaux hétérogènes, est la représentation de la microstructure ainsi que celle des mécanismes responsables du comportement mécanique des matériaux.

La théorie des composites nous offre des outils éprouvés pour mener à bien cette description, nous avons donc essayé, ici, de mettre à profit ces connaissances dans un cas où le modèle auto-cohérent classique semble trop restrictif.

Chapitre 1

Comportement des aciers austéno-ferritiques

Sommaire

1.1	Intérêt des aciers inoxydables austéno-ferritiques	12
1.1.1	Composition et cristallographie	12
1.1.2	Caractéristiques mécaniques	13
1.2	Intérêt du laminage intercritique	15
1.3	Physique du comportement à chaud	16
1.3.1	Ecrouissage	16
1.3.2	Mécanismes d'adoucissement	17
1.3.3	Effet de la vitesse et de la température	18
1.3.4	Essais de caractérisation	19
1.4	Cas des aciers austéno-ferritiques	19
1.4.1	Aciers ferritiques	20
1.4.2	Aciers austénitiques	21
1.4.3	Aciers biphasés	21
1.4.4	Evolution et influence de la microstructure	25
1.5	Questions ouvertes	26
1.6	Modèles utilisés pour la description de l'écoulement des polycristaux . . .	28
1.6.1	Modèles empiriques macroscopiques	28
1.6.2	Traitement micro-mécanique d'un problème	30
1.6.3	Prise en compte de la physique du matériau	30
1.7	Objectifs de l'étude et plan du travail	33

Introduction

Les propriétés mécaniques et électro-chimiques des aciers inoxydables austéno-ferritiques leur confèrent un fort intérêt industriel. Mais leur élaboration reste un problème délicat qui ralentit considérablement l'expansion de ces matériaux. En effet, le laminage intercritique (i.e. dans le domaine de coexistence de la ferrite et de l'austénite), incontournable pour l'obtention de certains produits plats et utile, de façon générale, pour l'élaboration de matériaux austéno-ferritiques, peut conduire, lorsqu'il est mal contrôlé, à des défauts et à des interruptions de process [17]. Ces phénomènes semblent provenir de la répartition des champs mécaniques dans les deux phases [17, 196, 73, 38]. Avant d'essayer de comprendre la nature de ces interactions, il est bon de rappeler les mécanismes intervenant dans les polycristaux monophasés à haute température. L'analyse d'essais classiques nous renseignera, ensuite, sur les mécanismes effectivement rencontrés dans l'austénite et dans la ferrite dans les cas monophasés et biphasés. La littérature permet d'expliquer une partie des phénomènes rencontrés, mais décrit également certaines spécificités des courbes contraintes-déformations macroscopiques qui restent incomprises.

1.1 Intérêt des aciers inoxydables austéno-ferritiques

On parle d'aciers inoxydables pour des matériaux constitués de fer (Fe) (souvent plutôt d'acier) et de chrome (Cr). La fraction massique de ce dernier doit être supérieure à 10,5% d'après les normes en vigueur.

Ce matériau est très utilisé du fait de ses bonnes propriétés mécaniques et de sa résistance à la corrosion (ce qui motive sa désignation sous le terme d'acier inoxydable). Son utilisation s'étend des domaines médicaux, pharmaceutiques et agro-alimentaires où sa facilité de nettoyage et de stérilisation est un avantage précieux, à des domaines tels que le transport, la chimie et la pétrochimie où sa résistance aux environnements agressifs le rend indispensable [57]. Ce matériau se décline en grandes classes et nuances sur lesquelles nous nous proposons de faire quelques rappels succincts.

1.1.1 Composition et cristallographie

Nous l'avons dit l'acier inoxydable est composé principalement de fer et de chrome mais il peut également contenir plusieurs éléments d'alliage tels le nickel (Ni) (de façon très classique), le manganèse (Mn), le titane (Ti), le niobium (Nb), le vanadium (V) et le molybdène (Mo).

On parle couramment d'aciers inoxydables ferritiques, austénitiques et austéno-ferritiques ; ces différentes catégories étant liées à la forme allotropique du fer qui prédomine au sein du matériau. Dans les conditions de pression standard le fer pur a une structure cristallographique cubique centrée (CC) jusqu'à la température de 910°C où se produit un changement de structure cristallographique et où les cristaux de fer deviennent cubiques à faces centrées (CFC). Le fer est appelé ferrite sous sa forme CC et austénite sous sa forme CFC. Ces deux variétés seront désignées dans la suite, respectivement, par les lettres grecques α et γ .

Les éléments d'addition cités précédemment vont avoir pour rôle essentiel de stabiliser une de ces formes. Par exemple, de par sa structure cristallographique, le chrome (CC) aura un effet α -gène, c'est-à-dire favorisant la structure ferritique, alors que le nickel (CFC) sera γ -gène, stabilisant la forme austénitique. Ces effets sont manifestes lorsque l'on considère les diagrammes d'équilibre thermodynamique. Celui qui nous intéresse le plus, au vu de la définition de l'acier inoxydable, est l'équilibre binaire Fe/Cr représenté figure 1.1. Ce diagramme permet de constater la prédominance de la ferrite sur l'austénite due à l'effet du chrome. Des traitements thermiques adaptés peuvent permettre d'obtenir, ou de figer, des structures austénitiques ou ferritiques particulières.

Les aciers austénitiques ont, généralement, de meilleures propriétés mécaniques que celles des aciers ferritiques, notamment du point de vue de la ductilité et de la ténacité. Cette constatation permet de comprendre que 80% des aciers inoxydables utilisés dans le monde sont des nuances austénitiques. Il est donc important de pouvoir étendre la zone de stabilité de l'austénite. C'est pourquoi les nuances les plus courantes d'aciers inoxydables se composent des trois éléments Fe, Cr et Ni. Usuellement, on utilise des coupes (figure 1.2) du diagramme ternaire pour prévoir la composition d'un alliage.

Comme on le voit sur ce diagramme le domaine austénitique et le domaine de coexistence austéno-ferritique sont bien plus développés qu'en l'absence de nickel, ce qui facilite l'obtention de nuances austénitiques ou austéno-ferritiques.

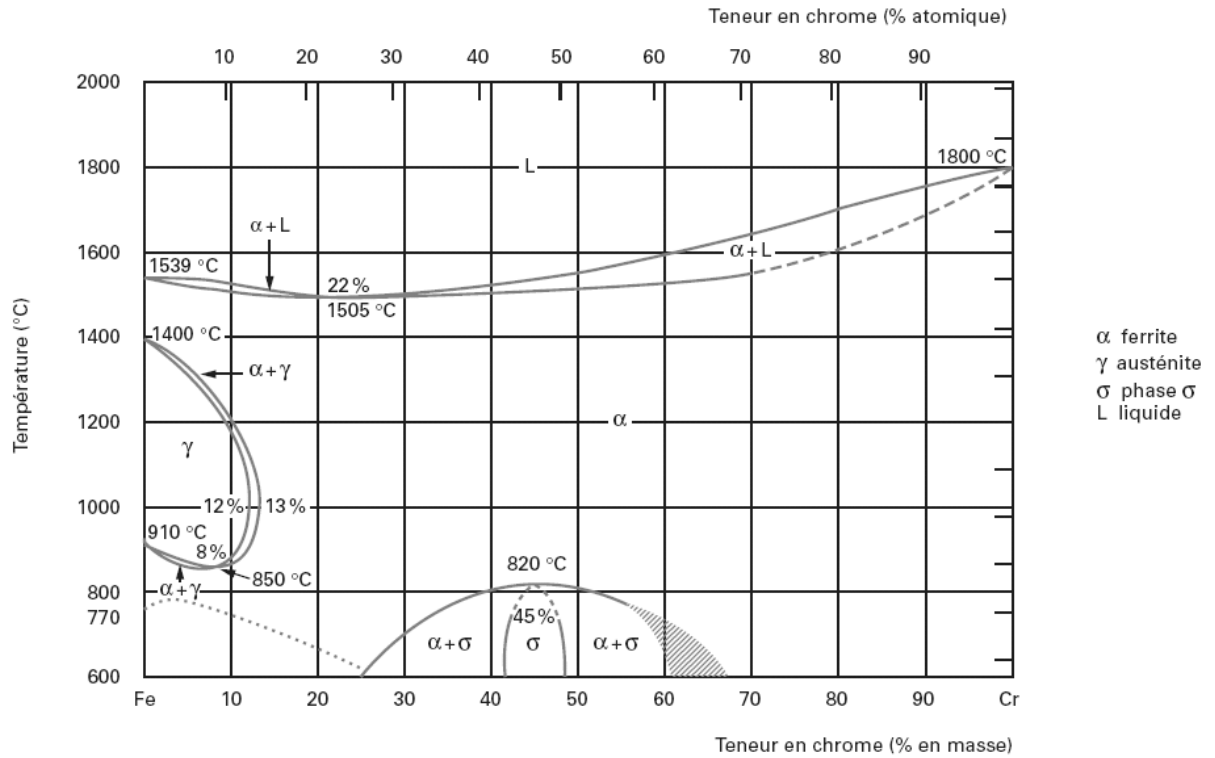


FIG. 1.1: Diagramme d'équilibre binaire Fe/Cr, d'après [10].

Matériau	Module de Young MPa	Limite d'élasticité MPa	Résistance à la rupture MPa	Allongement à la rupture %	Coefficient de dilatation linéaire entre 20 et 200°C $10^{-6} K^{-1}$
Ferritique	220 000	370	500	26	10
Austénitique	200 000	270	620	56	16
Austéno-ferritique	200 000	620	840	30	13

TAB. 1.1: Propriétés thermo-mécaniques de nuances industrielles, d'après [39].

1.1.2 Caractéristiques mécaniques

La table 1.1 présente quelques propriétés thermo-mécaniques de nuances couramment utilisées dans l'industrie. L'intérêt principal des aciers austéno-ferritiques, par rapport aux aciers ferritiques et austénitiques, concerne la limite d'élasticité et la résistance à la rupture.

Connaissant ces différents matériaux, on peut maintenant les associer à certaines applications en fonction de leurs caractéristiques générales (table 1.2). On peut remarquer dans cette table que les aciers austéno-ferritiques semblent poser des problèmes de mise en forme. C'est en effet le cas, il s'agit d'une des limitations principales de l'utilisation de ces nuances. C'est ainsi que les premières applications réalisées avec ces matériaux concernaient des pièces moulées. La détermination précise des conditions de formage permettant d'éviter l'apparition de fissures ou de défauts de surface (figure 1.3) est aujourd'hui encore une question qui n'est résolue que de façon empirique par le biais d'essais et d'erreurs.

La littérature sur le sujet [4, 134, 17, 91, 196] suggère que ces problèmes de formage sont liés à la nature composite du matériau et aux interactions, mal connues, entre les grains de ferrite et les grains d'austénite. Notre étude cherche à faire un premier pas vers la compréhension de ces phénomènes en utilisant

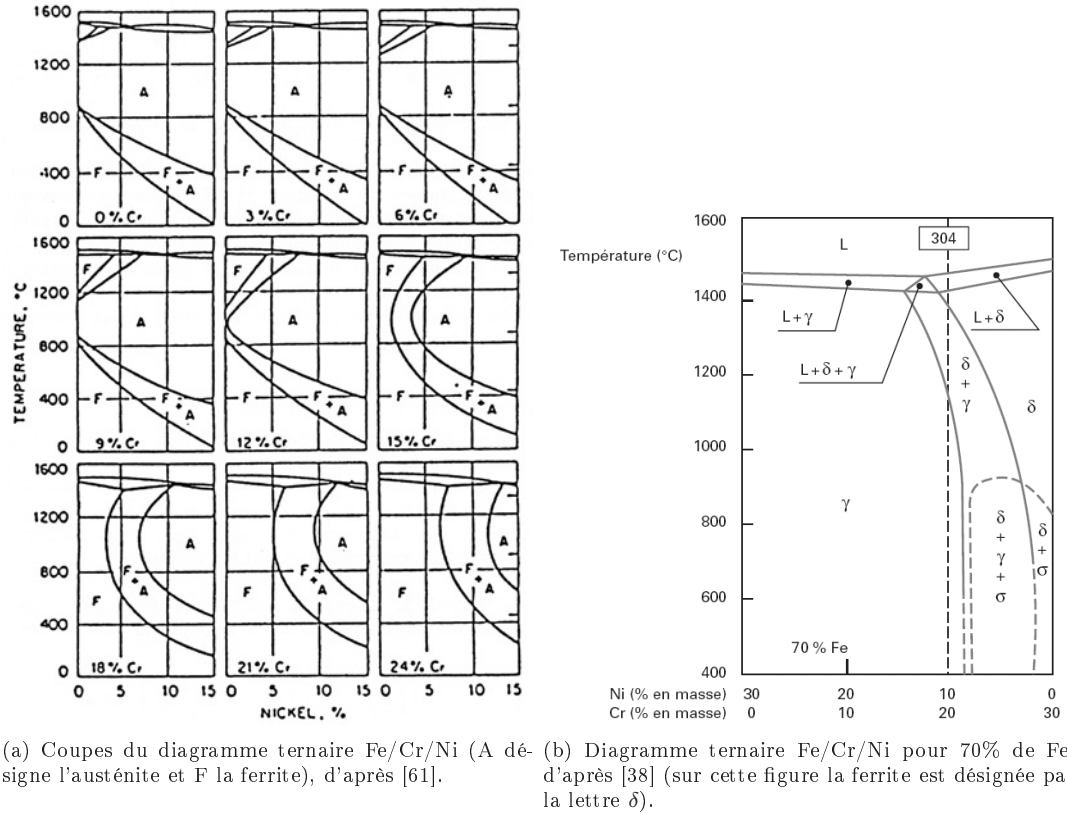


FIG. 1.2: Exemples de diagrammes d'équilibres thermodynamiques pour les matériaux composés de fer, de chrome et de nickel.

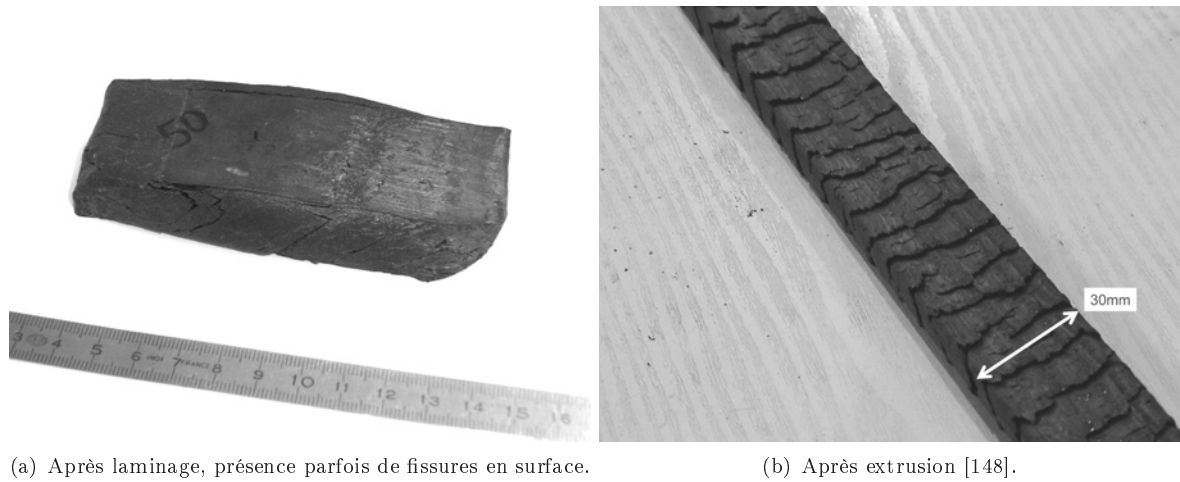


FIG. 1.3: Exemples de défauts pouvant apparaître au cours d'une mise en forme à chaud.

une description adaptée aux milieux hétérogènes à microstructure non déterministe¹.

¹Au sens où toutes les caractéristiques de la microstructure ne nous sont pas accessibles.

Famille de nuances	Résistance à la corrosion	Caractéristiques mécaniques	Formage	Soudage	Exemple d'application
Austénitique Fe-Cr-Ni(-Mo)	***	*	*	**	industrie alimentaire, restauration, fermentation et stockage ...
Austénitique Fe-Cr-Ni	***	*	***	*	Ustensiles ménagers ...
Ferritique Fe-Cr(-Ti/Nb)	**	**	***	*	Echappement automobile ...
Austénitique Fe-Cr-Ni Ferritique Fe-Cr(-Ti)	**	*	***	**	Cuve d'appareils électroménagers ...
Austénitique Fe-Cr-Ni(-N) Ferritique Fe-Cr	**	***	**	**	Structures pour matériels de transport ...
Austénitique Fe-Cr-Ni-Mo Austéno-ferritique Fe-Cr-Ni-Mo	***	**	*	***	Equipements pour les industries chimiques ...

TAB. 1.2: Quelques exemples d'applications des nuances d'aciers inoxydables en fonction de leurs caractéristiques, d'après [38]. (exigences : * moyennes, ** élevées, *** très élevées).

1.2 Intérêt du laminage intercritique

Le laminage des aciers inoxydables est, en général, réalisé entièrement dans le domaine austénitique. Pour ce faire le matériau doit être régulièrement réchauffé au cours de la mise en forme. Lorsque l'on souhaite obtenir un produit plat austéno-ferritique présentant une microstructure caractéristique du procédé thermo-mécanique utilisé, le laminage peut nécessiter de travailler dans un domaine intercritique, c'est-à-dire, dans un état où les deux phases coexistent. Cette opération est délicate, car les fractions de phases peuvent varier au cours de la sollicitation, ce qui se traduit, en pratique, par des fluctuations importantes de la réponse du matériau durant le laminage. Ainsi, une mauvaise maîtrise du procédé peut conduire à des défauts et à des arrêts fréquents de la ligne de production. C'est la raison pour laquelle ce type de traitement est réalisé le plus tard possible lors du processus d'élaboration.

Le laminage intercritique est parfois inévitable du fait des contraintes dimensionnelles sur le produit fini. En effet, dans le cas de tôles minces, le grand rapport surface sur volume place d'emblée le matériau dans le domaine biphasé, du fait des échanges thermiques rapides [17].

Nous voyons ainsi que la compréhension des mécanismes intervenant dans le cadre de la déformation à chaud d'aciers biphasés est un réel enjeu industriel. Cette connaissance pourrait conduire à des gains économiques en termes de rendement liés à des interruptions moins fréquentes de la ligne. Elle pourrait permettre également, une meilleure gestion énergétique du procédé car, si le laminage pouvait être mené à bien dans le domaine intercritique, il ne serait plus nécessaire de réchauffer le matériau pour rester dans le domaine austénitique. De plus, une meilleure maîtrise de ce procédé permettrait l'obtention de microstructures mieux contrôlées et potentiellement mieux adaptées aux besoins que celles obtenues actuellement.

La compréhension des phénomènes apparaissant au cours du laminage intercritique nécessite de s'intéresser aux phénomènes physiques intervenant dans le cadre de la déformation à chaud des métaux et, en particulier, aux données relatives aux matériaux ferritiques, austénitiques et austéno-ferritiques. Certaines de ces connaissances, bien établies, définissent une base commune à toutes les méthodes de modélisation de la déformation à haute température.

1.3 Physique du comportement à chaud

Un procédé de mise en forme consiste à imposer une histoire de chargement thermo-mécanique au matériau. L'objectif d'un tel procédé est d'une part, bien sûr, d'obtenir les caractéristiques dimensionnelles (macroscopiques) visées, mais également d'obtenir le comportement final recherché. Ce comportement est lié à la fois à la microstructure et à la composition chimique du matériau après formage. Ainsi, la détermination des paramètres de mise en forme demande une bonne connaissance du comportement et de l'évolution locale du matériau soumis à des champs thermo-mécaniques.

Les procédés de formage à haute température, qui sont ceux qui nous intéressent ici, mettent à profit une caractéristique classique des matériaux métalliques : à savoir l'aspect plus malléable qu'ils prennent lorsque la température augmente. Cet effet est lié à l'activation thermique du mouvement des dislocations. Avec l'augmentation de la température, on quitte progressivement le domaine de l'élasto-plasticité instantanée, pour obtenir des écoulements visqueux dépendant fortement de la vitesse. On peut s'en convaincre en considérant, par exemple, des essais de fluage ou de relaxation à différentes températures. Nous allons maintenant décrire schématiquement les différents phénomènes mis en jeu lors de la déformation à chaud d'un matériau métallique. L'effet de ces mécanismes sur la courbe contrainte-déformation du matériau est résumé sur la figure 1.4.

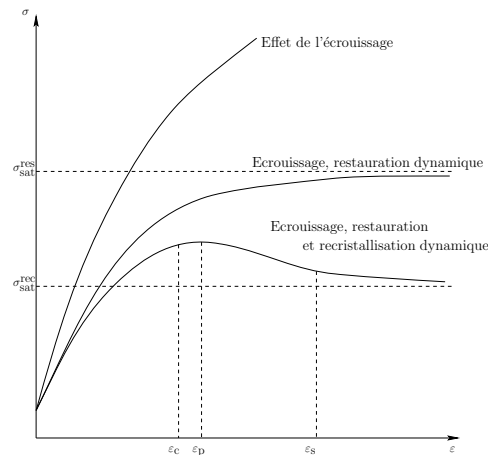


FIG. 1.4: Représentation schématique de l'effet des mécanismes d'adoucissement sur la courbe contrainte-déformation au cours d'un essai uniaxial.

1.3.1 Ecrouissage

Le premier phénomène qui apparaît lors de la sollicitation de métaux à haute température est une augmentation de la contrainte, c'est l'écrouissage du matériau. Son origine physique est liée à la multiplication des dislocations immobiles dans le matériau. En effet, la déformation plastique des monocristaux est liée à leur cisaillement par des dislocations² [61, 197]. Lors de leur parcours une grande partie d'entre elles vont s'immobiliser sur des défauts du réseau cristallin et former une "forêt" gênant³ la progression des dislocations mobiles. En parallèle, de nouvelles dislocations peuvent se former par des mécanismes de type Frank-Read. C'est la densification progressive de la forêt des dislocations bloquées qui inhibe la progression des dislocations mobiles ; ceci rigidifie le matériau à l'échelle macroscopique.

²Le mécanisme de glissement des dislocations conduisant aux amplitudes de déformation les plus importantes dans le cas présent seul ce mécanisme sera considéré dans ce travail.

³Cette "gêne" est associée au champ élastique lié à la présence des dislocations. Outre ce mécanisme d'autres sources de durcissement importantes peuvent également être invoquées, on pensera notamment à la formation de barrières de Lomer-Cottrell dans les matériaux présentant de faibles énergies de faute d'empilement.

1.3.2 Mécanismes d'adoucissement

Lorsque l'on considère un essai uniaxial en température, comme celui schématisé figure 1.4, on s'aperçoit que la croissance de la courbe contrainte-déformation est suivie d'une décroissance qui met en évidence l'existence de phénomènes d'adoucissement. Deux mécanismes principaux peuvent être distingués, la restauration et la recristallisation qui peuvent être statiques et intervenir après la sollicitation (ou durant la phase d'inter-passe pour un procédé de formage), ou dynamiques, et intervenir durant la sollicitation. Ces phénomènes d'adoucissement conduisent souvent pour les fortes déformations à un état stationnaire où ils viennent équilibrer l'écrouissage.

La restauration : Il s'agit de l'annihilation et de la réorganisation des dislocations en sous-grains faiblement désorientés. On dit alors qu'on a polygonisation. La grande mobilité des dislocations favorise ce phénomène. Ce processus peut s'accroître avec l'augmentation de la déformation. La désorientation devenant de plus en plus marquée, on parle alors de recristallisation continue ou de restauration étendue [32]. Ce phénomène est également thermiquement activé et va donc d'autant plus à l'encontre de l'écrouissage que la température est élevée.

La recristallisation : Lors de la déformation, il y a développement de zones d'accumulation des dislocations. Celles-ci peuvent faire apparaître des germes de recristallisation qui vont croître avec la déformation et donner naissance à un nouveau grain, équiaxe, pauvre en dislocations et fortement désorienté par rapport à ses voisins. Contrairement à la restauration, qui est un phénomène continu dans le temps, ce mécanisme provoque un adoucissement important et brutal du matériau. Il est favorisé lorsque la mobilité des dislocations est réduite et, qu'en conséquence, elles ne sont pas "éliminées" par restauration. Les germes de recristallisation apparaissent préférentiellement aux joints de grains, circuits de diffusion efficaces, mais une germination intragranulaire peut néanmoins intervenir.

Certaines courbes contrainte-déformation exhibent un pic révélateur d'un équilibre entre écrouissage et recristallisation dynamique (figure 1.4).

D'après de nombreux auteurs [59, 72, 94], la recristallisation dynamique serait liée à la déformation suivant une loi d'Avrami (1.6). Cette représentation s'obtient en considérant une succession de trois phases (figure 1.5) : incubation, germination et développement (ou croissance des grains). On introduit ainsi

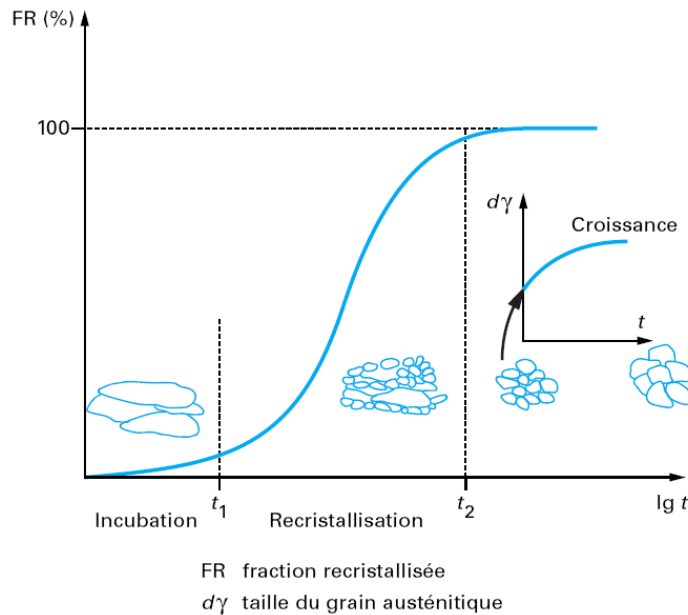


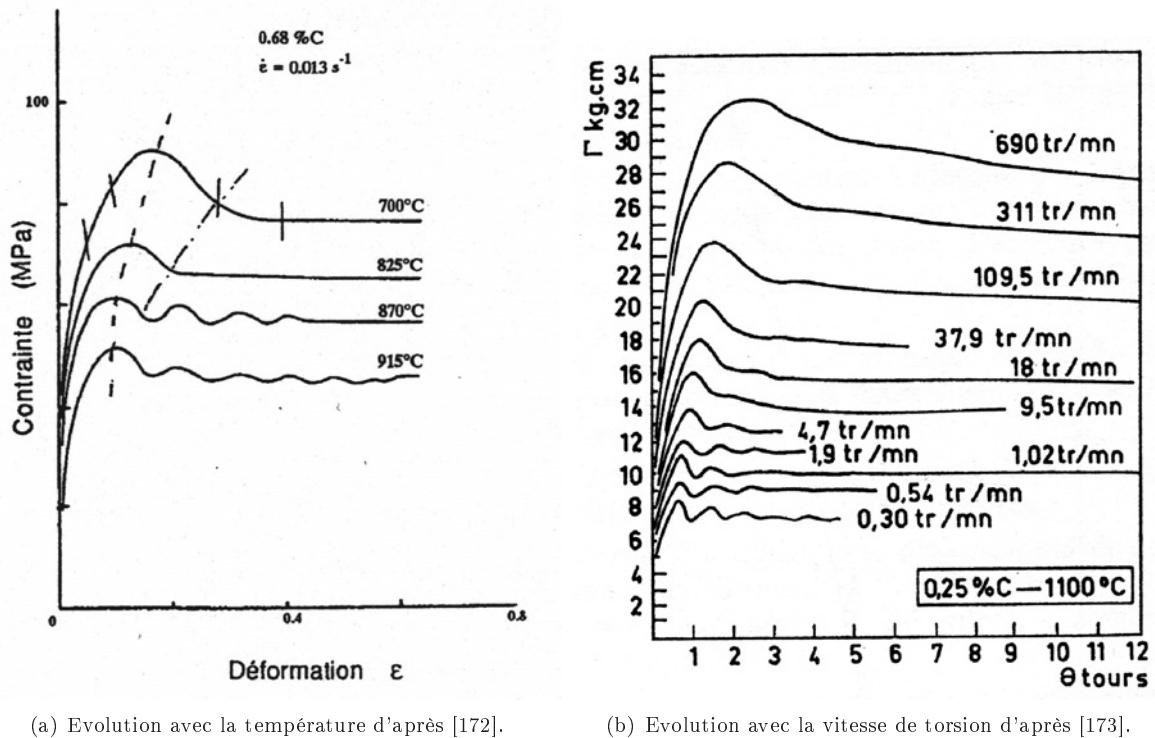
FIG. 1.5: Phases de la recristallisation d'après [59].

une déformation critique de début de recristallisation ε_c située en amont de la déformation de pic ε_p ($\varepsilon_c \approx 0.8\varepsilon_p$) [17, 4, 6, 106, 72, 126] et de la déformation stationnaire ε_s .

On trouve des études fines sur les mécanismes de recristallisation et de restauration dans la littérature (on citera par exemple [81]) mais nous n'en dirons pas plus ici car ces phénomènes ne seront pas modélisés en tant que tels dans notre travail.

1.3.3 Effet de la vitesse et de la température

Le mouvement des dislocations étant thermiquement activé, l'écrouissage sera plus lent lors de l'augmentation de la température, du fait de la meilleure mobilité et d'une annihilation/réorganisation facilitée pour les dislocations. Les phénomènes de recristallisation, quant à eux, apparaissent plus tôt mais sont moins stables du fait d'une élimination progressive des amas de dislocations par restauration et de l'écrouissage des grains nouvellement formés (ondulation de la courbe contrainte-déformation) figure 1.6(a). Le même genre d'évolution apparaît quand, au lieu d'augmenter la température, on di-



(a) Evolution avec la température d'après [172].

(b) Evolution avec la vitesse de torsion d'après [173].

FIG. 1.6: Evolution de la contrainte en fonction de la vitesse et de la température pour deux aciers.

minue la vitesse de sollicitation (figure 1.6(b)) ; cette constatation laisse supposer une correspondance vitesse/température.

De façon très générale, la contrainte peut être décomposée ([62] et [150]) en la somme d'une contrainte critique $\sigma_c(\epsilon, \alpha)$ correspondant à une plasticité indépendante du temps et d'une contrainte visqueuse $\sigma_v(\dot{\epsilon}, \alpha)$ fonction de la vitesse de déformation et des paramètres internes α . La figure 1.7 montre une prédominance des phénomènes de viscosité lorsque l'on modifie le trajet de chargement à haute température. On s'autorisera ainsi, dans la gamme de température qui nous intéresse, à assimiler la contrainte à sa composante visqueuse. De même, la partie élastique de la déformation à haute température peut être négligée devant la déformation plastique. A l'échelle macroscopique, on peut s'en convaincre en notant que le module de Young à haute température est de l'ordre de 100 GPa, ce qui conduit à des composantes élastiques de la déformation de l'ordre de 10^{-3} . On considérera de même que la vitesse de déformation peut en fait être assimilée à la vitesse de déformation plastique.

Le comportement étant purement visqueux, l'écoulement est fonction de la température et de la vitesse de sollicitation. En fait, comme le suggèrent les résultats expérimentaux de la figure 1.6, un paramètre peut être défini (1.1) en vue d'établir une équivalence entre l'évolution de ces deux variables pour une

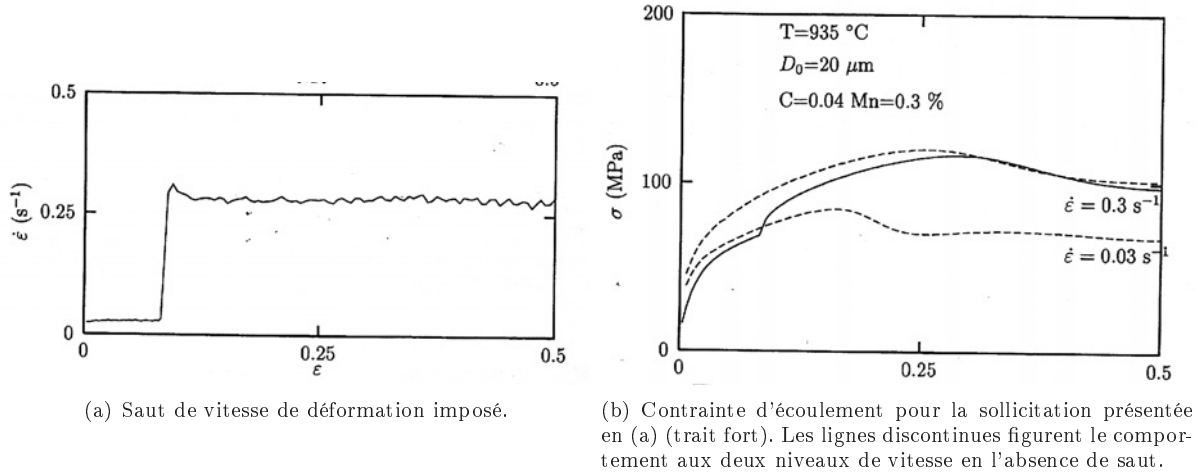


FIG. 1.7: Prédominance de la viscosité lors de la déformation des aciers à haute température d'après [6].

sollicitation uniaxiale; c'est le paramètre Z de Zener-Hollomon [216].

$$Z = \dot{\epsilon} \exp\left(\frac{Q}{RT}\right) \quad (1.1)$$

Cette équivalence, où $R = 8.314 \text{ J.K}^{-1}.\text{mol}^{-1}$ est la constante des gaz parfaits et T la température en Kelvin, fait intervenir une énergie d'activation Q et s'obtient en associant Z à l'état de contrainte.

1.3.4 Essais de caractérisation

Afin d'obtenir des informations sur le comportement à chaud des aciers austéno-ferritiques au cours de la mise en forme, des essais en laboratoire peuvent être réalisés pour caractériser la réponse du matériau. Ces différents essais doivent permettre de balayer des gammes de vitesses et de déformations étendues et doivent être suffisamment simples pour être reproductibles. Quel que soit l'essai utilisé, il conduit, pour des déformations importantes, à des évolutions microstructurales. Ces modifications influent sur la réponse du matériau. On peut ainsi chercher à se rapprocher des conditions de sollicitations caractéristiques du moyen de mise en forme que l'on souhaite modéliser. Ou, de façon plus générale, essayer de comprendre comment se déroule l'évolution dans le cadre d'un essai, afin de pouvoir simuler cette mise à jour pour des sollicitations quelconques. Plusieurs travaux ont montré la non-superposition des courbes contrainte-déformation dans le cas de modes de sollicitation différents [198, 97]. Les raisons avancées pour expliquer ces différences sont l'anisotropie du matériau, les évolutions différentes de la microstructure et les mécanismes d'écrouissage. Nous voyons ici l'importance des micro-mécanismes et la nécessité de ne pas se contenter de caractérisations et modélisations macroscopiques.

Les principaux essais réalisés pour modéliser le laminage à haute température sont : la torsion, la compression plane, la compression axisymétrique et la traction. Comme le mentionne Sellars [178], seuls les deux premiers types d'essais permettent une caractérisation dans des conditions proches de celles du laminage à chaud⁴. L'essai de torsion présente l'avantage de permettre l'étude d'une grande gamme de déformations et de vitesses tout en évitant les domaines d'instabilités plastiques. Les essais de compression plane ou axisymétrique, quant à eux, semblent plus simples à interpréter et à dépouiller. Ils présentent également une dépendance moins importante vis-à-vis de la forme de la microstructure [147, 91] mais couvrent un domaine de déformations moins large, typiquement jusque 2.5.

1.4 Cas des aciers austéno-ferritiques

Les remarques faites jusqu'à présent sont très générales et s'appliquent à la majeure partie des polycristaux métalliques à haute température. Nous allons maintenant caractériser de façon plus spécifique

⁴En effet les tenseurs gradient de la vitesse dans ces deux situations conduisent après changement de base au même tenseur vitesse de déformation (mais pas au même tenseur taux de rotation).

les matériaux auxquels nous nous intéressons.

1.4.1 Aciers ferritiques

Ils présentent, comme on l'a vu, une structure cubique centrée, associée à une haute énergie de faute d'empilement, ce qui limite l'extension du cœur des dislocations. Le glissement et la montée des dislocations sont alors favorisés ce qui permet leur annihilation. On a donc une restauration dynamique importante dans ces matériaux. Cette restauration dynamique va s'étendre, pour des déformations importantes, en une recristallisation dynamique continue [32]. On peut d'ailleurs voir ce mécanisme se développer par microscopie électronique en transmission. On peut également se convaincre qu'il s'agit du seul mécanisme d'adoucissement présent dans ce matériau en observant que la courbe de taux d'écroutissage $\theta = \partial\sigma/\partial\varepsilon$ en fonction de la contrainte (figure 1.8) ne présente pas de rupture de pente [94] caractéristique, si l'on se base sur le modèle de Kocks (qui sera rappelé sommairement dans la suite §1.6.3), d'un changement de mécanisme.

L'efficacité des mécanismes de restauration dans les aciers ferritiques induit une courbe contrainte-

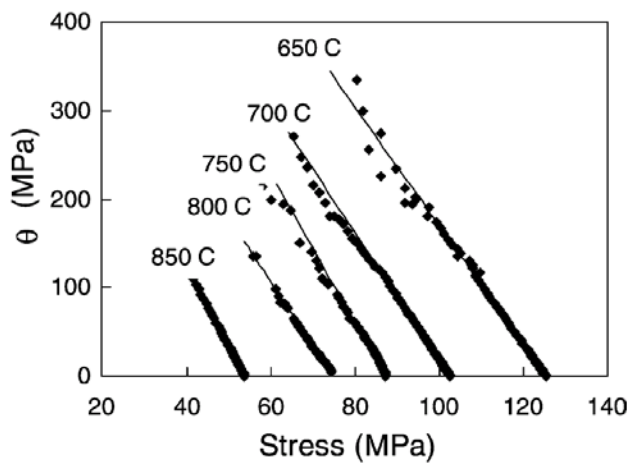


FIG. 1.8: Taux d'écroutissage en fonction de la contrainte pour un matériau ferritique d'après [94].

déformation très proche de celle d'un matériau parfaitement plastique.

Il est à noter également que, à froid, les systèmes de glissement activés dans le cristal CC sont principalement ceux de la famille $\{110\}\langle 111 \rangle$ alors que, à chaud, d'autres systèmes interviennent rendant la déformation du matériau plus facile. C'est ce qui explique que la ferrite soit plus raide que l'austénite à froid, alors qu'elle présente une contrainte d'écoulement deux à quatre fois moins importante que celle-ci à chaud [90]. Les autres systèmes activés à haute température sont de la forme $\{112\}\langle 111 \rangle$ ou encore $\{123\}\langle 111 \rangle$. On peut remarquer que ces systèmes possèdent la même direction de glissement mais des plans distincts on parle alors, de façon très imagée [195], de "pencil glide".

Nous allons maintenant présenter quelques courbes macroscopiques obtenues à partir d'essais sur des aciers ferritiques afin de caractériser la relation entre la contrainte et la déformation. La figure 1.9 propose quelques données issues de la thèse de Vernusse [205]. On voit clairement, à partir de ces graphes, que la ferrite ne s'écrouit pratiquement pas et présente un écoulement quasiment plastique parfait. Les résultats de [147] et [53] abondent également dans ce sens pour des compositions, des sollicitations et des températures différentes. On peut ainsi en conclure, qu'à haute température, la ferrite présente un écoulement très simple⁵ à modéliser.

Al-Jouni [4] a cependant obtenu des résultats différents en caractérisant un acier ferritique en torsion à haute température. Il remarque systématiquement sur ses courbes la présence d'un pic, similaire à celui qui apparaît à 800°C sur la figure 1.9(b). Al-Jouni signale que ce type de pic, qui n'est pas à associer à une recristallisation dynamique du matériau, a déjà été observé par d'autres auteurs lors de sollicitations en torsion. Dans le cas de ses données, il considère ce phénomène comme étant lié à la présence d'une forte texture.

⁵Beaucoup plus simple que sa déformation à froid [125].

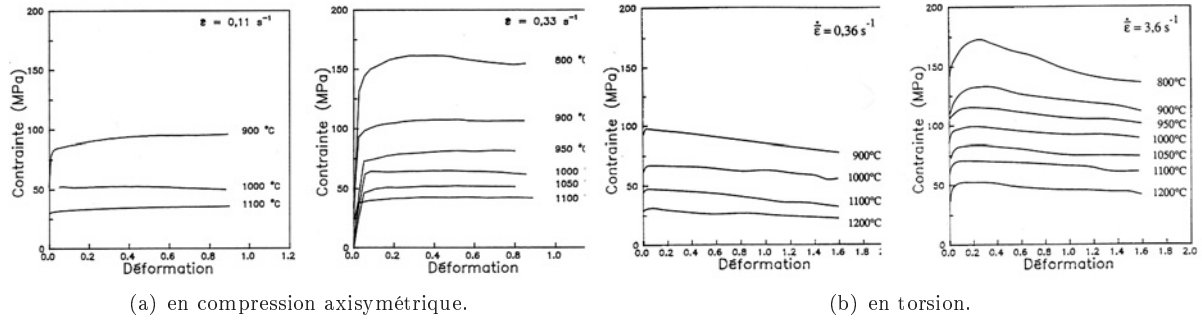


FIG. 1.9: Exemples de courbes d'écoulement pour un acier inoxydable ferritique extrait de [205].

1.4.2 Aciers austénitiques

L'austénite (CFC) possède une faible énergie de faute d'empilement et présente donc peu de restauration dynamique par rapport à la ferrite. Les dislocations ont alors tendance à s'accumuler dans les plans de glissement jusqu'à ce qu'une annihilation massive de ces dernières soit possible. On a affaire, dans ce cas, à un phénomène de recristallisation discontinue. La courbe contrainte-déformation présente alors une croissance plus "lente" que celle de la ferrite jusqu'à un ou plusieurs pics avant de tendre asymptotiquement vers un état stationnaire.

Comme dans le cas précédent, nous allons présenter quelques courbes d'écoulement austénitiques. Les données de Vernusse [205], homologues à celles fournies dans le cas de l'acier inoxydable ferritique, présentent un écrouissage beaucoup plus progressif que celui obtenu dans la ferrite. Ce phénomène peut

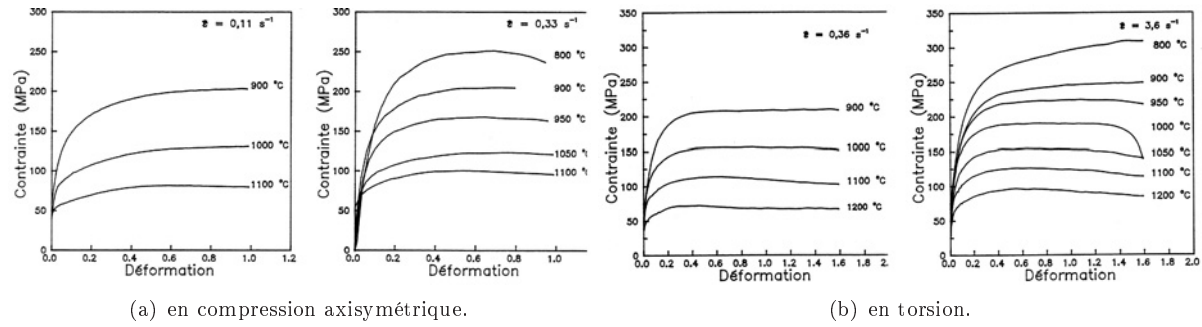


FIG. 1.10: Exemples de courbes d'écoulement pour un acier inoxydable austénitique extrait de [205].

s'interpréter comme l'existence d'une restauration dynamique beaucoup moins efficace dans le cas austénitique que dans le cas ferritique. Ces courbes, contrairement à celles proposées par [126] ou [51, 127, 94] par exemple, ne présentent pas de pic caractéristique de la recristallisation dynamique. Ce phénomène est malgré tout très courant dans le cas des aciers austénitiques.

On remarque que, dans un cas où la recristallisation dynamique a lieu, le taux d'écrouissage du matériau n'est plus linéaire (figure 1.11) comme précédemment dans le cas ferritique. Enfin, précisons que les systèmes de glissement prédominants dans le cas d'une structure cubique à faces centrées sont de la forme $\{111\}\langle 110 \rangle$.

1.4.3 Aciers biphasés

L'adoucissement des aciers biphasés semble faire intervenir les mêmes mécanismes que pour les phases pures, à savoir plutôt de la recristallisation dynamique dans l'austénite et de la restauration dynamique dans la ferrite. Certains auteurs [52] ont observé des courbes contrainte-déformation sur lesquelles semblent apparaître successivement les deux comportements. La première phase est un plateau horizontal, caractéristique de la restauration dynamique de la ferrite, qui est suivie par une phase transitoire présentant une croissance de la contrainte, caractéristique d'un transfert de charge entre l'austénite et la

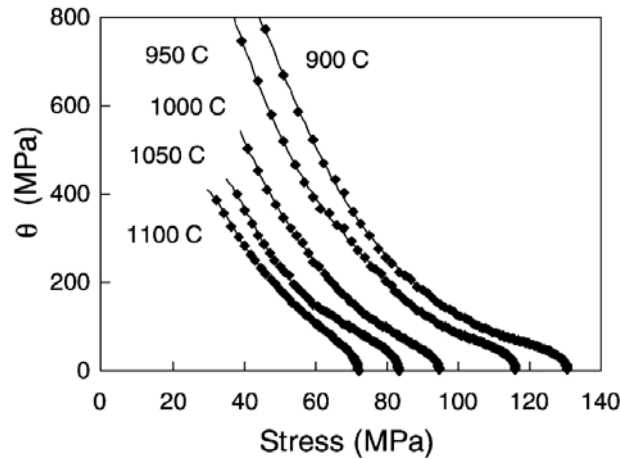


FIG. 1.11: Taux d'écrouissage en fonction de la contrainte pour un matériau austénitique d'après [94]. La perte de linéarité est caractéristique d'un changement de micro-mécanisme.

ferrite. Une dernière phase correspondrait à la recristallisation de l'austénite. La présence ou non d'un maximum de contrainte lors des essais n'a rien de systématique et semble très liée au mode de sollicitation [11]. Les différents auteurs rapportent, après observation de la microstructure que, lorsque la ferrite est en matrice, la déformation se concentre initialement dans cette phase avec une très faible déformation de l'austénite [53]. Ce phénomène ralentit ou inhibe considérablement l'apparition de recristallisation austénitique.

La principale caractéristique du comportement à chaud des aciers inoxydables austéno-ferritiques est leur très faible ductilité ce qui est cohérent avec les problèmes rencontrés au cours de la mise en forme. Ces problèmes de ductilité, bien moins présents dans les phases pures comme le montre la figure 1.12, seraient dus à la partition des déformations entre la ferrite et l'austénite conduisant à des concentrations de contrainte à l'interphase et favorisant ainsi l'apparition de fissures [57]. Ce phénomène est nécessairement dépendant de la forme des grains, car une forme aiguë conduira à une concentration de contrainte plus importante. Certains auteurs [11, 90] précisent également que les liens d'orientation de type Kurdjumov-Sachs⁶ (KS) doivent être pris en compte pour représenter l'interaction ferrite/austénite. Ils notent une forte dépendance de la ductilité du biphasé en fonction de l'existence ou non de ces relations d'orientation, comme le suggère la figure 1.13. Un matériau brut de fonderie présente souvent ce type de relations de cohérence entre les phases. Celles-ci ont tendance à s'estomper avec l'évolution de la déformation. Un matériau recuit, quant à lui, présentera des interfaces incohérentes (comme c'est sans doute le cas pour le matériau de Vernusse soumis à une prédéformation et à un recuit à 1200°C pendant une demi-heure). Il semble que lorsque l'on sollicite un acier inoxydable austéno-ferritique à basse température ou à forte vitesse, et que celui-ci présente des phases liées par des relations d'orientation, l'austénite empêche la ferrite d'accommoder une grande partie de la déformation, cela parfois jusqu'à ce que des décohérences aux interfaces interviennent. A contrario, en l'absence de relations de type KS, la ferrite accommode beaucoup plus facilement la déformation, allant même parfois jusqu'à glisser le long des joints austénitiques [4]. C'est également la présence ou non de ces relations d'orientation qui justifie la différence de forme obtenue pour la courbe d'écoulement brut de coulée présentée à la figure 1.16.

Les différences de comportement observées entre le biphasé et les polycristaux monophasés seraient donc liées à une hétérogénéité de la répartition de la déformation dans les deux phases, fortement dépendante de la forme de la microstructure et des relations d'orientation qui peuvent exister entre la ferrite et l'austénite. Il semble donc que ce problème soit essentiellement mécanique et ne fasse pas intervenir de nouveau phénomène physique.

C'est d'ailleurs également la conclusion de Balancin [11] qui interprète la forme des courbes d'écoulement en fonction de la prédominance de plusieurs phénomènes. Si la croissance de la courbe se fait rapidement, l'auteur considère qu'on a une forme typique de restauration dynamique efficace, ce qu'il associe à la phase ferritique seule. Lorsque cette phase est suivie d'un plateau, tout se passe comme si l'on était dans un

⁶Des détails concernant ces relations d'orientation peuvent également être trouvés dans [97].

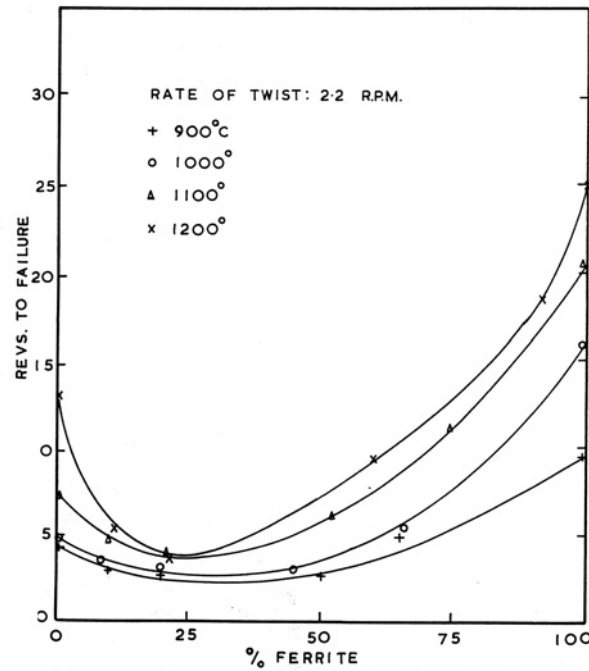


FIG. 1.12: Nombre de tours avant rupture sur un acier inoxydable austéno-ferritique sollicité en torsion en fonction de sa fraction volumique de ferrite, d'après [134].

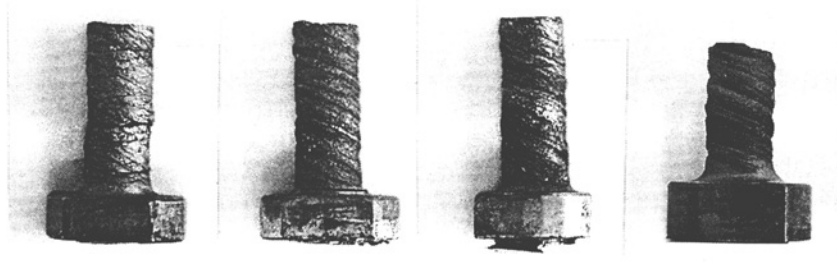


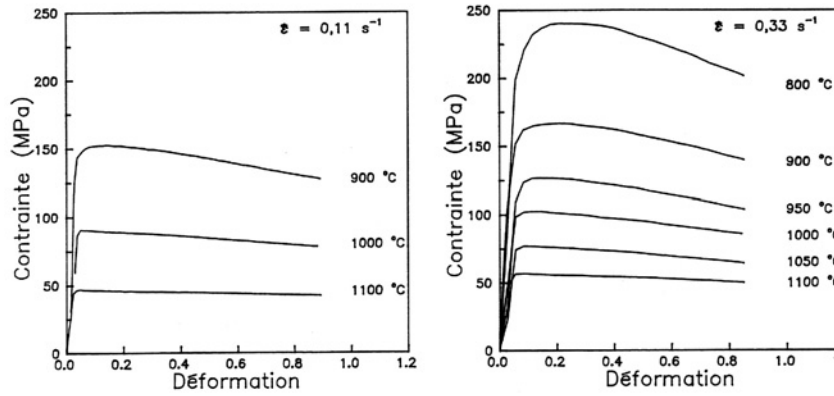
FIG. 1.13: Différence de ductilité en torsion (vitesse $1s^{-1}$, niveau de déformation équivalent 1.6), respectivement de gauche à droite, de trois échantillons bruts de fonderie sollicités à 1000°C (présence de fissures en surface et à cœur), 1100°C (présence de fissures en surface) et 1200°C (présence de fissures en surface), et d'un échantillon recuit (absence de fissures), d'après [147]. Fraction d'austénite 65%.

cas ferritique. L'ensemble de ces deux conditions est en général rencontré lorsque la fraction d'austénite est faible.

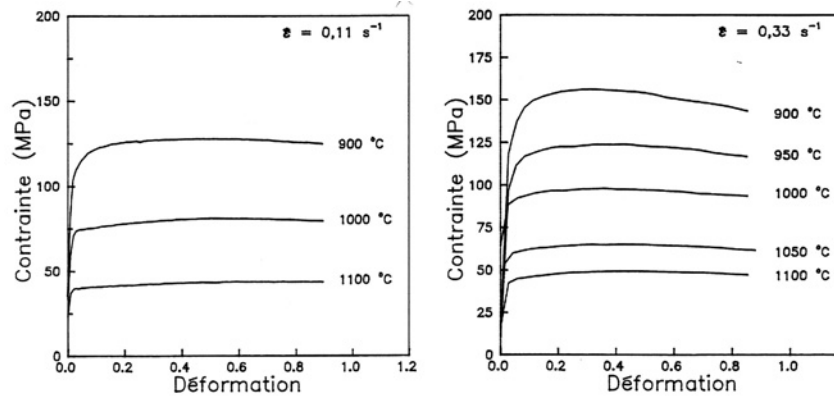
Si la phase de croissance rapide présente une amplitude importante et est suivie d'une diminution rapide de la contrainte d'écoulement, l'auteur considère que nous sommes en présence d'un effet lié aux relations d'orientation. Dans ce cas, l'austénite rigidifie le matériau dans un premier temps, bien que la restauration reste très efficace, puis la perte des relations d'orientation au fil de la déformation va conduire à une relaxation progressive de la contrainte d'écoulement.

Enfin, lorsque l'on observe un écoulement progressif du matériau, Balancin considère que la phase dure est en fraction suffisante pour qu'il y ait interaction des îlots d'austénite. Cette phase participe alors, de façon importante, à l'écrouissage du matériau.

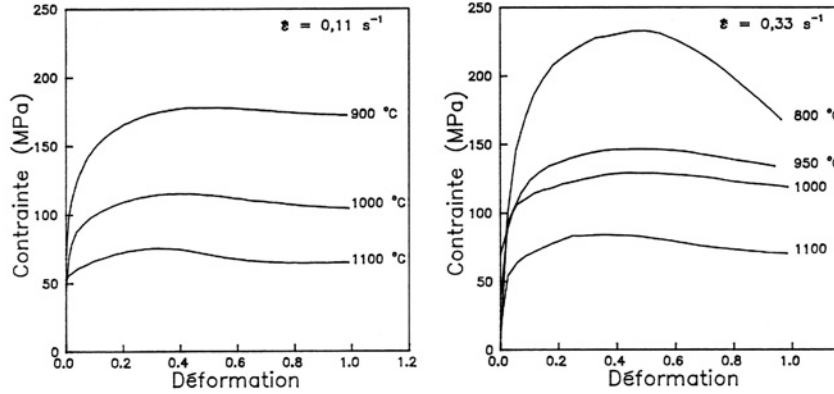
Nous observons bien ces différents types de comportement sur les courbes de Vernusse de la figure 1.14. Mais, si ces classifications paraissent cohérentes, l'appartenance des courbes à l'une ou l'autre de ces catégories semble être une fonction complexe de la fraction de phase, du mode et de la vitesse de sollicitation ainsi que de la température. Vernusse interprète, quant à lui, ces différences comme étant liées à



(a) Alliage comprenant 70% de ferrite.



(b) Alliage comprenant 50% de ferrite.



(c) Alliage comprenant 30% de ferrite.

FIG. 1.14: Exemples de courbes d'écoulement en compression axisymétrique pour un acier inoxydable austéno-ferritique extrait de [205].

des restaurations ou à des recristallisations typiques de l'une ou l'autre de ces phases. Exception faite de la nuance à 70% de ferrite, où il associe la décroissance à un effet de distribution de phases. Ce choix est justifié dans la mesure où le traitement thermo-mécanique subi par les matériaux a dû leur faire perdre leur relation d'orientation, ce qui exclut donc, a priori, l'explication fournie par Balancin. De plus, l'analyse microstructurale de Vernusse, met en évidence le regroupement de l'austénite en amas, alors qu'il n'a détecté ni fissures, ni texture prononcée sur le matériau initial qui auraient pu expliquer l'adoucissement observé.

Iza Mendia [90] fait remarquer, qu'un pic peut apparaître lorsque le matériau biphasé est sollicité en

torsion. L'auteur suggère [91, 147] que ce pic pourrait être lié à une évolution morphologique. Il considère que la torsion est un mode de sollicitation, en général, plus sensible et présentant une dépendance plus complexe à la forme de la microstructure que la compression.

1.4.4 Evolution et influence de la microstructure

Assez peu d'études considèrent à la fois l'évolution de la microstructure et celle des courbes d'écoulement. Il est donc assez difficile de se faire une idée précise de l'influence de la morphologie microstructurale sur la réponse macroscopique du matériau. De plus, les données disponibles ne révèlent pas de tendance évidente. Nous considérons, ici, quelques exemples d'expériences réalisées sur des matériaux recuits, ce qui limite donc l'influence des relations d'orientation.

Partant de microstructures différentes, pour une même fraction volumique (figure 1.15) Vernusse n'a pu mettre en évidence de différences de comportement macroscopique, même si de légères différences apparaissent à basse température.

A contrario, un effet morphologique apparaît clairement sur la figure 1.16 au cours d'un essai de torsion

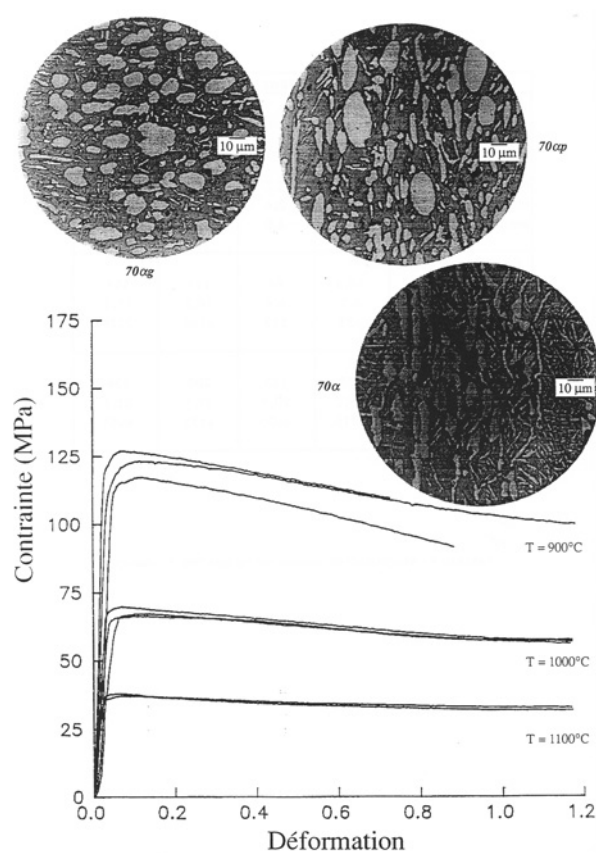


FIG. 1.15: Absence d'influence de la microstructure au cours d'essais de compression axisymétrique ($0.03s^{-1}$) pour des matériaux à 70% de ferrite, d'après [205].

partant de microstructures qui sont soit équiaxes, soit très allongées dans une direction. Le durcissement observé, dans le cas où la microstructure est allongée et parallèle à la direction de torsion, semble être lié au fait que ce mode de sollicitation "force" les grains austénitiques à interagir, alors que dans les deux autres situations la ferrite peut accommoder plus facilement la déformation. Cet effet morphologique disparaît presque totalement lorsque l'on substitue une compression plane à la torsion comme le montre [147]. Un effet de forme est néanmoins visible au cours d'une compression axisymétrique à la figure 1.17. Le passage d'une microstructure allongée dans la direction de compression, donc proche d'un assemblage où l'on peut supposer la déformation homogène (borne de Voigt), à une microstructure plus équiaxe, accompagne l'adoucissement de l'écoulement macroscopique.

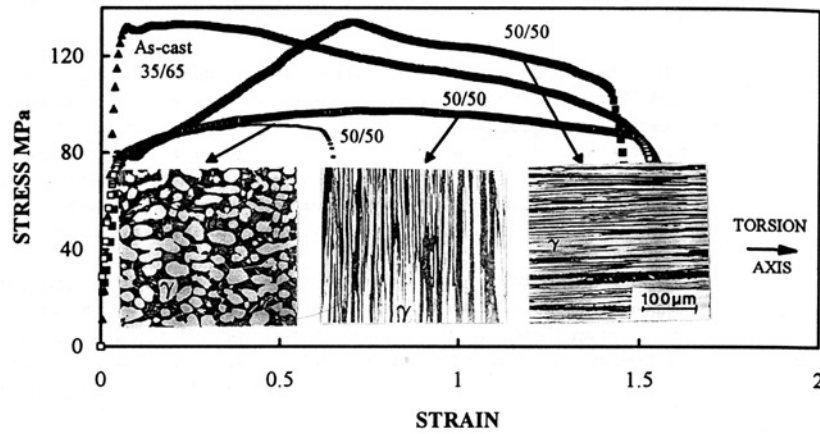


FIG. 1.16: Mise en évidence de l'effet de la morphologie sur l'écoulement en torsion de matériaux présentant des microstructures différentes, d'après [147]. Tous ces matériaux sont recuits sauf pour la courbe qui le précise. Cette expérience est réalisée à 1000°C pour une vitesse de déformation équivalente de 1s^{-1} .

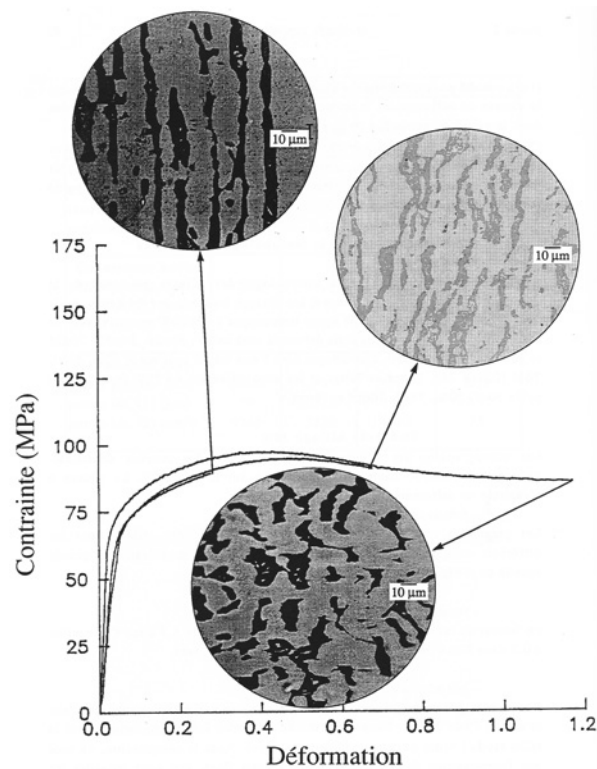


FIG. 1.17: Evolution de la forme des domaines de phase au cours d'une compression axisymétrique (0.03s^{-1}) d'un biphasé comprenant 30% de ferrite, d'après [205].

1.5 Questions ouvertes

La revue bibliographique précédente a éclairci quelques points concernant le comportement des aciers inoxydables austéno-ferritiques à haute température. Malgré tout, un certain nombre de questions restent entières. Nous allons tâcher d'en rappeler quelques-unes.

La première question qui se pose est celle de la décroissance systématique des courbes à 70% de ferrite présentées par Vernusse (figures 1.14(a) et 1.18). A priori, ce comportement est spécifique des aciers

biphasés, mais, bien que plusieurs explications aient été avancées, il est difficile de voir clairement quel mécanisme est à la source de ce phénomène. L'hypothèse la plus crédible, a priori, est celle de Vernusse (en effet celle de Balancin ne s'applique pas sur des matériaux recuits et aucune texture n'a été détectée par Vernusse) qui consiste à supposer un effet morphologique. L'auteur a même caractérisé la spécificité morphologique qui, selon lui, serait responsable de la forme de la réponse. Il s'agit du regroupement de l'austénite sous forme d'amas, au cours de la sollicitation, qui adoucirait le comportement macroscopique. Néanmoins, l'auteur n'a pas pu justifier davantage son point de vue.

Une autre question ouverte est celle du croisement et de l'intervention de courbes contrainte-déformation. La figure 1.18 présente l'écoulement de matériaux biphasés et monophasés. La courbe à 70% de ferrite

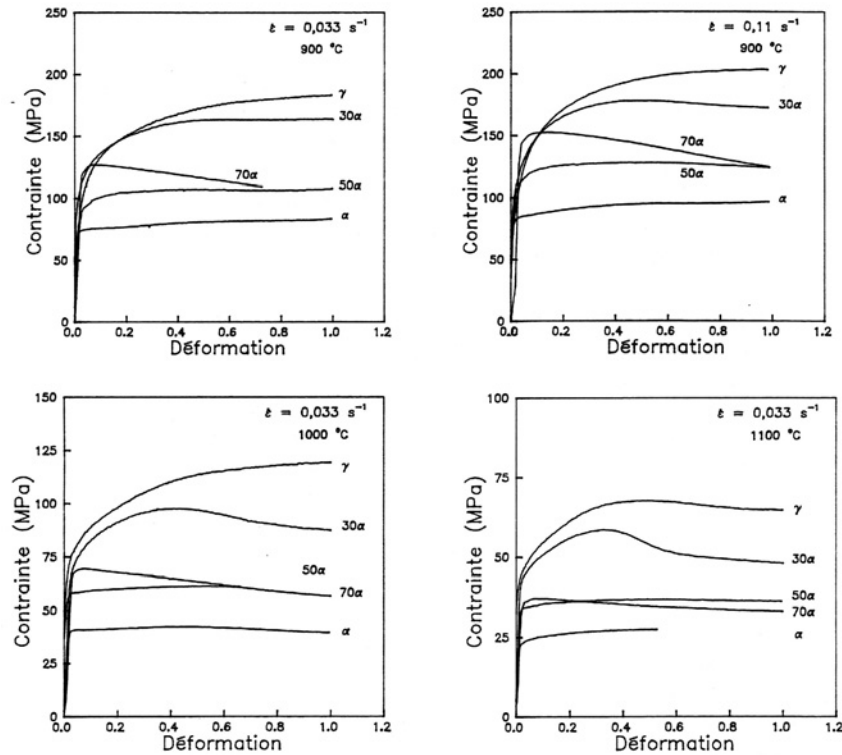


FIG. 1.18: Cette figure présente quelques cas de “mélanges” des courbes d’écoulement du biphasé (biphasé plus riche en phase molle plus dur que des biphasés riches en phase dure) en compression axisymétrique.

est située initialement au-dessus de celle à 50% de ferrite et croise parfois celle-ci lors de l’évolution de la déformation. Ce comportement inhabituel est sûrement en rapport avec celui décrit plus haut pour le matériau à 70% de ferrite. Malgré tout, dans un cas général, on peut se demander ce qui peut amener un biphasé plus riche en phase molle à être plus rigide qu’un matériau contenant plus de phase dure. L’avancée de l’écoulement semble avoir tendance à “réordonner” les courbes, ce qui indique que le paramètre responsable de ce phénomène évolue avec la déformation. Là encore, l’évolution morphologique du matériau semble une hypothèse pertinente qui mérite une investigation plus approfondie.

Al-Jouni observe un croisement similaire mais, dans son cas, les choses sont encore plus préoccupantes, car c’est la ferrite pure initialement au-dessus du biphasé à 30% d’austénite, qui vient croiser cette dernière (figure 1.19). Ainsi, l’ajout de phase dure aurait tendance à ramollir le matériau. Comme on l’a déjà précisé, Al-Jouni considère que ce phénomène est lié à une texture prononcée dans la ferrite pure. On pourrait aussi penser à la présence d’un autre mécanisme de déformation absent dans la ferrite pure mais apparaissant dans le cas biphasé.

Deux types de phénomènes annexes susceptibles d’accommoder la déformation dans les aciers inoxydables austéno-ferritiques ont déjà été évoqués très brièvement. Il s’agit de l’apparition de fissures et du glissement interphase [146]. Les fissures semblent être favorisées lorsque des relations d’orientation existent

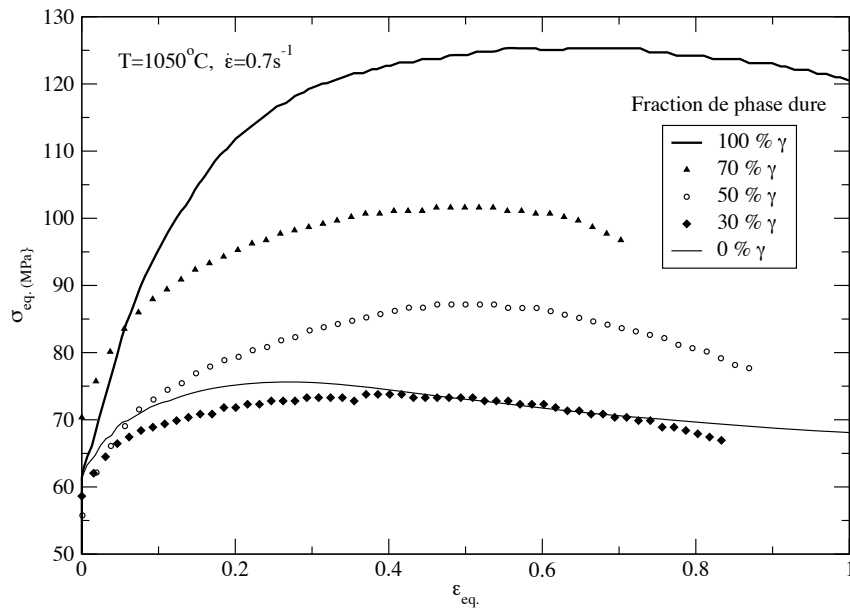


FIG. 1.19: Même type de comportement qu'à la figure 1.18 mais cette fois c'est la courbe à 30% d'austénite qui présente une contrainte d'écoulement inférieure à celle de la ferrite pure.

entre les phases ; certains auteurs précisent même qu'après l'apparition de fissures, ils ont encore pu distinguer des relations de type KS au niveau de la zone de décohésion [91]. En l'absence de telles relations, le glissement interphase semble dominer pour accommoder les incompatibilités, qui peuvent apparaître entre la ferrite et l'austénite. Mais nous n'avons pas de réponse concernant les modalités d'apparition de ce glissement, et la part qu'il prend dans la déformation du matériau.

Ces questions font appel à une caractérisation du matériau à l'échelle de la microstructure. Pour espérer pouvoir progresser sur ces questions, il faut ainsi intégrer, dans un modèle, des données mesurées à l'échelle des phases, et à l'échelle des grains du matériau. Nous avons vu précédemment que l'agencement de la microstructure revêtait un caractère particulièrement important, nous chercherons donc à traiter précisément cet aspect.

1.6 Modèles utilisés pour la description de l'écoulement des polycristaux

Il existe un grand nombre de modèles permettant d'estimer le comportement de structures polycristallines. Ceux-ci se distinguent par leur contenu physique et par l'échelle des phénomènes qu'ils représentent. Dans cette section nous allons considérer deux familles de modèles. Ceux qui visent uniquement à décrire le comportement macroscopique du matériau dans des conditions proches de celles d'essais déjà réalisés et ceux qui cherchent à modéliser de façon plus fine le matériau afin de comprendre les phénomènes qui interviennent plus localement, dans le but d'ouvrir des possibilités d'extrapolation en dehors des conditions d'essai et pour des configurations microstructurales différentes.

1.6.1 Modèles empiriques macroscopiques

Le matériau peut être vu de différentes façons. Tout d'abord, il peut être assimilé à une boîte noire associant une réponse mécanique à des conditions d'essais. Le modèle consiste alors à donner la meilleure représentation mathématique possible des mesures effectuées. Aucune physique n'est intégrée dans ce type de relations. La difficulté liée à de telles formulations est de se limiter à un nombre restreint de paramètres, permettant néanmoins de décrire avec une bonne précision le comportement visé. Ce type de modélisation sert, en général, de résultat de base pour échafauder des modèles au contenu physique plus riche. Nous allons présenter dans cette section des modèles visant uniquement à prévoir le comportement

macroscopique du matériau et intégrant peu de contenu physique.

Prévision de la contrainte établie

Nous avons vu qu'à partir d'une certaine déformation les essais de sollicitation monotone à haute température tendaient, en général, asymptotiquement vers un état stationnaire qui s'apparente à un domaine de fluage en régime établi. Cette observation permet d'utiliser certaines relations phénoménologiques établies dans un tel cadre. Dans le cas du fluage, il existe une relation liant le paramètre Z de Zener-Hollomon à la contrainte à la saturation σ_{sat} (figure 1.4) en considérant une loi puissance (1.2) d'exposant n appelé sensibilité à la contrainte.

$$Z = A \sigma^n \quad (1.2)$$

Le comportement à chaud d'un solide peut se décomposer schématiquement en trois domaines dans un repère $(\log(Z); \log(\sigma))$ [150] et la loi définie par l'équation (1.2) n'est valide que pour les deux premiers domaines. Au cours du stade I, celui des très faibles contraintes caractéristiques du fluage, n est sensiblement égal à 1. Pour le stade II, stade des contraintes et des vitesses de déformation moyennes, le facteur n est compris grossièrement entre 3 et 8 [82, 150, 185, 62, 108]. La validité de cette loi empirique est perdue à haut niveau de contrainte (stade III), où elle peut être remplacée par une loi exponentielle :

$$Z = A' \exp(\beta\sigma) \quad (1.3)$$

C'est pour ce niveau de sollicitation que l'on peut voir apparaître un pic de contrainte ou un phénomène d'ondulation de la courbe d'écoulement caractéristique d'un processus de recristallisation dynamique. Garofalo [64], puis Sellars et Tegart [182], ont proposé une forme valide sur tout le domaine d'évolution de la contrainte :

$$Z = A'' [\sinh(\alpha\sigma)]^{n'} \quad (1.4)$$

Ce type de relation est aujourd'hui très utilisé dans la littérature et a été vérifié sur une large gamme de matériaux (voir par exemple [93]). Ces lois, qui sont à l'origine purement phénoménologiques, peuvent être justifiées dans le cadre de la théorie de l'activation thermique [150].

Prévision du régime transitoire

La description précédente quoiqu'utile reste limitée, car elle ne décrit, a priori, que le régime établi. D'autres expressions sont nécessaires pour décrire la courbe contrainte-déformation du matériau lors de l'écoulement. Ces relations sont, en général, scalaires et s'appliquent à la contrainte équivalente et à la déformation logarithmique équivalente relative à l'essai considéré. Nous pouvons citer quelques expressions utilisées dans la littérature pour différents matériaux et différents modes de sollicitation. Fields et Backofen [60] et [6] utilisent la relation (1.5a), Voce [206] et Kocks [96], quant à eux, proposent l'une des relations les plus classiques (1.5b), où σ_i décrit la contrainte initiale et σ_{sat} la contrainte de saturation ou la contrainte de pic. Ces paramètres sont obtenus pour différentes vitesses et températures en utilisant les relations valides pour le régime établi. Sah [175] a proposé une loi de la forme (1.5c), très similaire à ce que proposent [179, 180, 16] et [72] à travers (1.5d). Une forme très différente (1.5e) est également proposée par [177] et [94].

$$\sigma = A(T) \cdot \dot{\varepsilon}^{n(T)} \cdot \varepsilon^{m(T)} \quad (1.5a)$$

$$\sigma = \sigma_i + (\sigma_{\text{sat}} - \sigma_i) [1 - e^{-C\varepsilon}] \quad (1.5b)$$

$$\sigma = \sigma_i + (\sigma_{\text{sat}} - \sigma_i) [1 - e^{-C\varepsilon}]^m \quad (1.5c)$$

$$\sigma = B [1 - e^{-C\varepsilon}]^m \quad (1.5d)$$

$$\sigma = \sigma_{\text{sat}} + (\sigma_i - \sigma_{\text{sat}}) \ln[\varepsilon_r (\varepsilon + \varepsilon_0)] \quad (1.5e)$$

$$\sigma - \sigma_{\text{sat}} = (\sigma_{\text{sat}2} - \sigma_{\text{sat}}) \left[1 - e^{-k \left(\frac{\varepsilon - \varepsilon^c}{\varepsilon^p} \right)^m} \right] \quad \text{pour } \varepsilon > \varepsilon^c \quad (1.6)$$

En général, ces lois sont caractéristiques d'un mécanisme de déformation. Ici, il s'agit du domaine d'écrouissage avec restauration dynamique. Elles sont donc utilisables jusqu'à la déformation critique ε^c . Lorsque la recristallisation dynamique intervient une autre relation doit être utilisée. L'adoucissement lié à ce mécanisme est souvent associé à une relation d'Avrami (1.6) [94, 72, 16] qui est valide à partir de ε^c et tend vers une saturation $\sigma_{\text{sat}2}$. Une revue de ces expressions et de leur domaine d'application est

proposée dans [69].

Un premier enrichissement physique de ces modèles macroscopiques est possible à travers l'utilisation de lois à variables internes.

Lois à variables internes

Les lois à variables internes peuvent, elles aussi, modéliser le matériau d'un point de vue macroscopique mais cherchent à représenter l'évolution des mécanismes locaux à travers l'évolution de paramètres internes. Ces modèles ont également pour objectif le respect des principes de la thermodynamique. Cette famille de modèles est décrite en détail dans [108], nous citerons par exemple le modèle de Delobelle [45] qui permet de représenter le comportement d'aciers inoxydables austénitiques pour une large gamme de températures et de sollicitations mais qui, pour cela, fait intervenir un grand nombre de variables internes. Les densités de dislocations sont des variables internes particulièrement intéressantes pour la modélisation du comportement car celles-ci sont directement liées aux mécanismes de plasticité apparaissant dans le matériau. Mais une description utilisant ces paramètres nécessite une prise en compte plus explicite de la microstructure et de la physique associée à celle-ci car, pour l'instant, les formulations proposées n'intègrent pas la nature polycristalline du matériau.

1.6.2 Traitement micro-mécanique d'un problème

La représentation du comportement d'un matériau à l'échelle macroscopique à travers l'identification de lois, telles celles présentées en §1.6.1, peut se révéler très utile associée à la mécanique des milieux continus pour prévoir la réponse d'une pièce chargée dans une gamme de sollicitations connue. Mais cette démarche ne permet pas de décrire la réponse du matériau lorsque la microstructure est différente de celle des conditions d'essai⁷. Cette observation motive l'introduction d'une démarche micro-mécanique qui consiste à identifier le comportement à une échelle plus fine, proche des micro-mécanismes locaux que l'on peut penser indépendants de l'arrangement microstructural, et à assembler les constituants élémentaires en utilisant un modèle de microstructure.

Concrètement, si on considère un élément de microstructure⁸ soumis à un champ mécanique macroscopique, la démarche micro-mécanique (figure 1.20) consiste à obtenir le champ local à l'aide de relations de localisations basées sur les résultats généraux de calculs de micro-structures, à appliquer la loi de comportement à l'échelle locale puis à revenir au champ macroscopique en utilisant une opération de moyenne. Cette démarche nous permet donc de lier les champs macroscopiques au travers d'un comportement effectif, tout comme le ferait la méthode traditionnelle basée sur une identification macroscopique; mais cette approche est plus versatile du fait de son application pour des microstructures variées. Ce dernier avantage est également une contrainte forte, en effet pour être efficace un modèle de changement d'échelle doit non seulement très bien modéliser les phénomènes locaux dans le milieu mais également bien rendre compte de l'agencement microstructural, ce qui est souvent une tâche délicate; ainsi l'utilisation d'une démarche micro-mécanique pouvant s'avérer lourde sera réservée à des applications où celle-ci s'avère impérative. Cette approche est néanmoins très attirante du fait de son riche contenu physique et de son large domaine d'application.

La section suivante présente le type de lois susceptible d'être utilisé à une échelle plus locale ainsi que des méthodes générales permettant le dialogue entre description macroscopique et description microscopique du comportement.

1.6.3 Prise en compte de la physique du matériau

Nous intégrons, maintenant, les hétérogénéités locales et les mécanismes physiques responsables de la déformation dans notre matériau. Nous nous plaçons donc dans un cadre micro-mécanique polycristallin. Les lois de comportement locales proposées sont alors des lois cristallines, celles-ci modélisent les mécanismes à l'échelle des grains. La déformation est, dans le domaine qui nous intéresse, représentée par le glissement le long des plans cristallographiques. Dans le cadre viscoplastique, ce mécanisme lie la vitesse le long d'un système aux efforts sur ce système, au travers de relations similaires à celles décrites à l'échelle macroscopique (loi puissance, sinus hyperbolique [12] ...).

L'évolution de l'écrouissage sur chaque système est un point central de ces relations. De nombreuses lois

⁷Du fait de l'arrangement initial ou de l'évolution de la microstructure dans une gamme de sollicitation différente par exemple.

⁸Présentant un certain nombre de propriétés comme nous le verrons dans la suite.

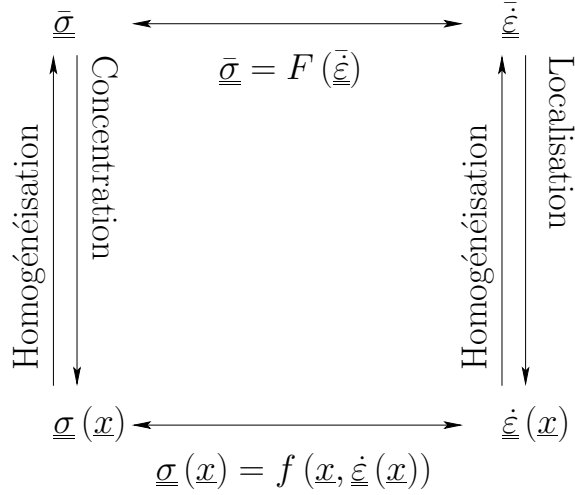


FIG. 1.20: Représentation schématique de la méthode micro-mécanique dans un cadre viscoplastique : il s'agit d'arriver à caractériser le comportement viscoplastique F en faisant une incursion à l'échelle locale.

phénoménologiques existent et consistent essentiellement en des écrouissages multiplicatifs [95] et cinématiques [29]. L'une des difficultés est que l'écrouissage des différents systèmes est lié et qu'il est souvent difficile de bien représenter ces interactions. Une autre difficulté vient de l'identification des paramètres et de l'absence, une fois encore, de liens entre les paramètres identifiés à cette échelle et les mécanismes de restauration et de recristallisation présentés précédemment. Une façon d'intégrer cette physique est de faire dépendre l'écrouissage de variables internes à sens physique telle que la densité de dislocation. Un exemple de ce type de formulation est présenté dans la suite.

Lois en densité de dislocation

Comme nous l'avons vu en décrivant les mécanismes physiques de la déformation à chaud §1.3, c'est le mouvement et le nombre des dislocations dans le matériau qui vont caractériser principalement la déformation. Il est donc logique d'imaginer un modèle basé sur l'évolution de la population des dislocations dans le matériau. Les modèles les plus simples ne font intervenir, comme variable interne, que la densité de dislocation totale mais des descriptions plus sophistiquées (distinguant les différents systèmes de glissement, prenant en compte l'existence de cellules...) sont possibles [167, 138, 133]. Les dislocations présentes dans le matériau peuvent être mobiles et ainsi contribuer à la déformation, ou être immobiles, et jouer le rôle d'obstacles au mouvement des dislocations mobiles. Décrire l'évolution de la densité de dislocations passe par une description statistique des phénomènes : de création des dislocations mobiles, d'immobilisation (c'est-à-dire de conversion des dislocations mobiles en dislocations fixes), d'annihilation avec d'autres dislocations et de remobilisation des dislocations immobiles. Les équations générales décrivant la méthode doivent permettre de lier la vitesse de glissement le long des plans cristallographiques et la cission sur le système aux densités de dislocations. Ces équations sont classiquement données par la loi d'interaction avec les dislocations immobiles (toutes sont considérées en tant "qu'arbres de la forêt") (1.7a) et par la relation d'Orowan (1.7b)

$$\tau = \alpha \mu b \sqrt{\rho_i} \quad (1.7a)$$

$$\dot{\gamma} = \rho_m b \bar{v} \quad (1.7b)$$

où τ et $\dot{\gamma}$ désignent respectivement la cission et le taux de glissement viscoplastique sur le système, et où la densité de dislocations a été décomposée en partie mobile et partie immobile ($\rho = \rho_m + \rho_i$). b décrit la norme du vecteur de Burgers, μ le module de cisaillement du polycristal et $\bar{v} = dx/dt$ la vitesse moyenne des dislocations mobiles. α est un facteur de l'ordre de l'unité dont la nature est précisée dans [61]. Ces deux expressions associées à l'équation d'évolution de la densité de dislocation avec le glissement (1.8) et à l'hypothèse que la densité de dislocation mobile est très faible devant la densité de dislocations immobiles

(et qu'on peut ainsi assimiler $\rho \approx \rho_i$), forme le cadre usuel pour les modèles en densité de dislocations.

$$d\rho = \left(\frac{\partial \rho^+}{\partial \gamma} - \frac{\partial \rho^-}{\partial \gamma} \right) d\gamma \quad (1.8)$$

C'est dans la description des mécanismes liés à l'évolution des densités de dislocations, et donc dans l'expression des fonctions ρ^+ et ρ^- , que ces modèles diffèrent. Afin de présenter une démarche complète, nous allons rappeler l'un des modèles les plus classiques, qui est celui de Kocks [96]. Pour Kocks $\rho \approx \rho_i$ impose que les mécanismes de création (de dislocations fixes) liés à $d\rho^+$ et les mécanismes d'annihilation (de dislocations fixes) liés à $d\rho^-$ ne consistent respectivement qu'en l'immobilisation et en la restauration ou en la réorganisation des dislocations. Ainsi, il écrit que l'immobilisation est caractérisée par un libre parcours moyen λ qui, d'après lui, est une fonction de la densité de dislocations. En effet, il considère que le libre parcours moyen est inversement proportionnel à la racine carrée de la densité de dislocations fixes, ce qui revient à considérer, par exemple, les dislocations de la forêt réparties de façon homogène sur le plan de glissement. On en déduit donc l'équation (1.9) où β est une constante d'ajustement.

$$d\rho^+ = \rho_m \frac{dx}{\lambda} = \rho_m \frac{dx}{\beta} \sqrt{\rho} \quad (1.9)$$

Concernant la restauration Kocks représente celle-ci par une dépendance linéaire en la densité de dislocation, c'est-à-dire :

$$d\rho^- = A \cdot \rho \cdot d\gamma \quad (1.10)$$

où A est une constante dont une interprétation est fournie par l'auteur. L'évolution de la densité de dislocations intègre ces deux composantes et s'écrit sous la forme (1.11a) qui peut se reformuler en utilisant la relation d'Orowan (1.11b). On déduit de cette expression un taux d'écrouissage local θ (1.11c).

$$d\rho = \rho_m \frac{dx}{\beta} \sqrt{\rho} - A \cdot \rho \cdot d\gamma \quad (1.11a)$$

$$= \left[\frac{\sqrt{\rho}}{b\beta} - A \cdot \rho \right] d\gamma \quad (1.11b)$$

$$\theta = \frac{d\tau}{d\gamma} = \frac{d(\alpha\mu b\sqrt{\rho})}{d\gamma} = \frac{\alpha\mu}{2\beta} - \frac{A}{2}\tau = \theta_0 \left(1 - \frac{\tau}{\tau_0} \right) \quad (1.11c)$$

Ce qui peut s'intégrer en une équation de type Voce locale, où γ_i et τ_i sont respectivement les niveaux de glissement et de cisssion initiaux .

$$\int_{\gamma_i}^{\gamma} dg = \int_{\tau_i}^{\tau} \frac{dt}{\theta} = \frac{\tau_0}{\theta_0} \int_{\tau_i}^{\tau} \frac{dt}{\tau_0 - t} \quad (1.12)$$

$$\gamma = \gamma_i - \frac{\tau_0}{\theta_0} \ln \left| \frac{\tau_0 - \tau}{\tau_0 - \tau_i} \right| \quad (1.13)$$

$$\tau = \tau_i + (\tau_0 - \tau_i) \left[1 - \exp \left(\frac{(\gamma_i - \gamma)\theta_0}{\tau_0} \right) \right] \quad (1.14)$$

Cette approche simplifiée peut en fait être développée de façon plus systématique dans le cadre de la théorie de l'activation thermique [150, 62] en donnant une base thermodynamique plus solide à ce type de modèles. A partir de (1.11c) et d'un modèle de Taylor, Kocks conclut à une évolution linéaire du taux d'écrouissage macroscopique avec la contrainte (comme c'est le cas pour la ferrite à la figure 1.8). Cette prévision est souvent vérifiée au début de l'essai et peut ensuite dévier. Cette perte de validité traduit l'apparition de nouveaux micro-mécanismes. On considère alors que le matériau quitte le domaine de l'écrouissage avec restauration dynamique et qu'on a, par exemple, recristallisation dynamique (figure 1.11).

Le modèle de Kocks n'est qu'un exemple très simple qui ne distingue pas d'écrouissage suivant les différents systèmes mais définit une sorte de durcissement moyen. De nombreux modèles plus sophistiqués existent dans la littérature.

Un autre avantage de l'utilisation de densités de dislocations pour représenter le comportement est qu'il n'est pas nécessaire de connaître toute l'histoire de chargement du matériau, les densités jouant alors le rôle de variables d'état scalaires.

Comportement de l'assemblage

Nous avons considéré les lois d'écoulement à une échelle cristalline, discutons maintenant de la méthode permettant à partir de ces lois de passer à une prévision sur le matériau considéré. Plusieurs possibilités s'offrent à nous pour décrire l'agrégat et son comportement.

Une méthode naturelle de description est de représenter de façon déterministe le matériau à modéliser. On peut ensuite réaliser une simulation par éléments finis discrétisant en un grand nombre d'éléments chacune des hétérogénéités du matériau. Les inconvénients d'une telle méthode sont : sa difficulté de mise en œuvre (il faut mailler une structure complexe), les limitations fixées par la faisabilité du calcul (seuls des calculs sur quelques grains peuvent être menés en pratique, ce qui nécessite pour décrire un ensemble suffisamment représentatif de réaliser un nombre important de simulations) et surtout la nécessité de connaître ou de générer une microstructure déterministe (en général on ne connaît un matériau qu'à travers des caractéristiques statistiques). Malgré ces inconvénients, il est clair que ce type de modélisation peut permettre d'analyser et de comprendre les différents phénomènes apparaissant dans un agrégat polycristallin. Il est à noter que, lorsqu'un volume élémentaire représentatif existe, et que le problème peut accepter des conditions aux limites périodiques, la méthode par transformée de Fourier rapide [100, 102] présente une plus grande efficacité que la méthode des éléments finis, mais reste limitée en matière de lois de comportement et d'évolution de microstructure.

Nous avons choisi néanmoins d'utiliser les méthodes dites d'homogénéisation en champ moyen pour représenter le comportement du matériau à partir de celui de ses constituants. Cette méthode présente l'avantage d'être plus simple à mettre en œuvre d'un point de vue numérique et de représenter la microstructure du matériau d'un point de vue statistique, ce qui permet de ne pas se limiter à des simulations sur un petit nombre de grains. D'autre part, on peut ainsi obtenir des résultats associés à des matériaux présentant des similarités statistiques, mais pouvant différer dans le détail de leurs microstructures, ce qui est la situation la plus couramment rencontrée lors d'essais. Le chapitre suivant va présenter quelques notions et hypothèses à la base de ce type de formulation. On peut préciser dès à présent que ce choix de représentation occasionne également des inconvénients qui seront détaillés dans la suite et qui rendent ces deux modes de traitement complémentaires.

Une fois le modèle d'assemblage micro-mécanique obtenu, rien ne nous empêche d'utiliser ce modèle comme une loi de comportement dans un modèle éléments finis pour résoudre un problème de structure où à chaque étape du calcul, un problème élément fini polycristallin ou un problème d'homogénéisation sera résolu aux points d'intégration (figure 1.21).

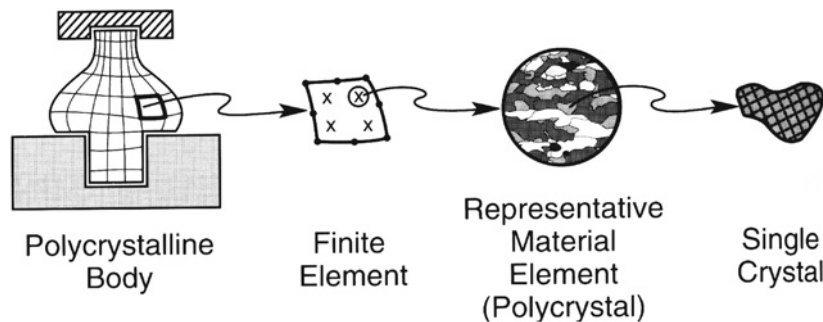


FIG. 1.21: Couplage d'un modèle polycristallin avec un modèle éléments finis pour la résolution d'un problème de structure, d'après [97].

1.7 Objectifs de l'étude et plan du travail

L'étude bibliographique a montré que la compréhension du comportement mécanique à haute température des aciers inoxydables austéno-ferritiques comprenait encore des zones d'ombre. Les difficultés rencontrées lors de la mise en forme semblent dues à la partition des champs mécaniques entre les deux phases en présence et aux évolutions microstructurales différentes qui en résultent.

L'objectif de ce travail est de comprendre et d'essayer de modéliser les phénomènes liés au caractère biphasé du matériau qui peuvent apparaître lors de telles sollicitations. Nous avons choisi, dans cette étude, de représenter le comportement à l'aide d'un modèle intégrant à la fois sa cristallographie et son aspect biphasé. En effet, ces deux caractéristiques semblent jouer un rôle important dans la réponse du matériau, au vu des observations proposées dans cette introduction. De plus, l'aspect non déterministe de la microstructure nous a incité à choisir un modèle d'homogénéisation pour modéliser ces polycristaux biphasés.

La démarche de modélisation peut être représentée de la façon suivante (figure 1.22). Afin de confirmer

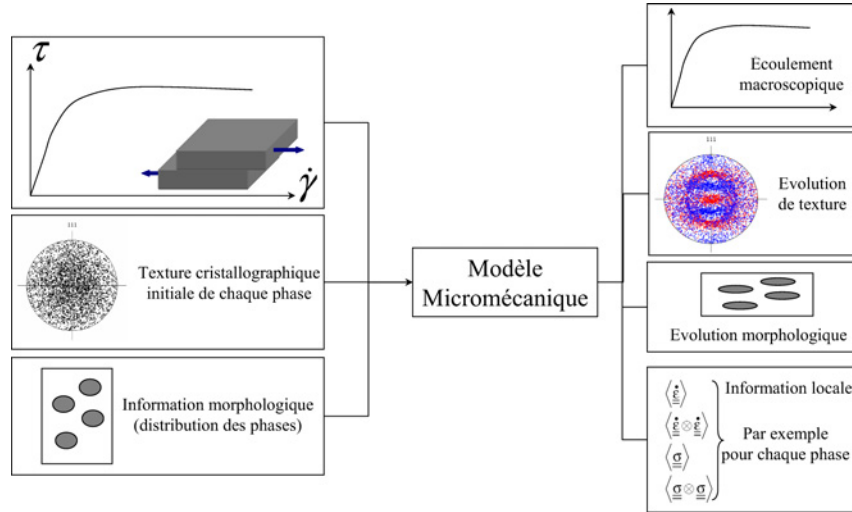


FIG. 1.22: Principe de la modélisation micromécanique envisagée.

les observations prévues dans la littérature et d'obtenir des données susceptibles d'alimenter nos modèles et de valider leurs prévisions une étude expérimentale est présentée. Elle se compose de caractérisations à la fois macroscopiques, dans le but d'identifier les paramètres du comportement des phases pures, et locales afin de décrire la microstructure, de comprendre les mécanismes et de se donner des informations susceptibles d'être comparées aux résultats du modèle.

Le modèle, quant à lui, devra intégrer des informations microstructurales sur la répartition des phases, sur les orientations cristallographiques et sur le comportement viscoplastique du matériau et nous fournir des données sur l'évolution de ces paramètres microstructuraux en fonction de l'état de sollicitation. Le modèle produira, en outre, des informations statistiques sur les champs mécaniques aux différentes échelles mises en jeu.

Chapitre 2

Introduction à l'homogénéisation des polycristaux viscoplastiques

Sommaire

2.1	Description générale de l'homogénéisation	36
2.1.1	Représentation statistique des matériaux hétérogènes	36
2.1.1.a	Elément microstructural représentatif	37
2.1.1.b	Macro-homogénéité	37
2.1.1.c	Fonctions de corrélation à p -points d'appuis	38
2.1.2	Passage d'une échelle à une autre	41
2.1.2.a	Définition intuitive des champs macroscopiques	41
2.1.2.b	Méthode de localisation : calcul de microstructures	42
2.1.3	Formulations "ad hoc"	46
2.1.4	Approches variationnelles	46
2.1.4.a	Formulation classique	47
2.1.4.b	Formulation de Hashin et Shtrikman	47
2.2	Cas des polycristaux viscoplastiques	50
2.2.1	Représentation et cinématique	50
2.2.2	Traitement du problème d'homogénéisation non linéaire instantané	55
2.2.2.a	Modèle statique et modèle de type Taylor	56
2.2.2.b	Modèle incrémental de Hill et modèle sécant	56
2.2.2.c	Modèles tangent et affine	59
2.2.2.d	Formulation variationnelle de Talbot et Willis	60
2.2.2.e	Formulation variationnelle de Ponte Castañeda	60
2.2.2.f	Modèles au second ordre	62
2.2.2.g	Informations sur les champs mécaniques	63

Introduction

L'objectif de ce chapitre est de présenter la démarche micro-mécanique d'homogénéisation et, de façon plus spécifique, les méthodes utilisées pour la modélisation de polycristaux sollicités à haute température et présentant un comportement viscoplastique. Dans un premier temps, les principes généraux de la méthode et son application dans un cadre linéaire sont rappelés. En effet, les procédures d'homogénéisation non linéaires reposent, en général, sur la linéarisation du problème afin de pouvoir utiliser les solutions linéaires existantes.

La plasticité des métaux étant un problème industriel fondamental, ce fut l'un des premiers problèmes d'homogénéisation non linéaire pour lequel des solutions furent cherchées. Ainsi la littérature sur le sujet est imposante et très riche. Nous nous restreindrons ici aux comportements viscoplastiques dérivant d'un potentiel et nous détaillerons certaines procédures de linéarisation qui peuvent être utilisées dans ce cadre. Toutes ces méthodes permettent, connaissant l'état actuel du matériau, de définir sa réponse instantanée à un chargement. Mais au cours de l'application de ce chargement le matériau évolue plastiquement, nous devons donc mettre à jour son comportement mais aussi sa microstructure (forme des grains, orientation des axes cristallographiques...) afin de prendre en compte cette évolution.

2.1 Description générale de l'homogénéisation

La démarche micro-mécanique par homogénéisation se base, comme nous l'avons vu, sur une représentation statistique du matériau et sur la définition d'un volume élémentaire représentatif (VER). C'est sur cet élément de base, beaucoup plus grand que la taille caractéristique des hétérogénéités du matériau qu'est réalisée la démarche à proprement parler. Il s'agit, partant d'une "solicitation macroscopique" sur le VER, par exemple une contrainte pour fixer les idées, de "localiser" l'effet de ce chargement à l'échelle de la microstructure afin d'utiliser la relation de comportement à ce niveau pour en déduire le champ de déformation¹ associé. A partir de ce champ résultant local, on déduit le champ de déformation macroscopique à l'aide d'une "prise de moyenne". La démarche consiste donc à rechercher le "comportement effectif" macroscopique en faisant une incursion à l'échelle locale. Ce faisant, nous obtenons plus d'informations que le simple comportement effectif, car il est clair à travers la description précédente, que pour atteindre cet objectif, il nous faut recueillir des informations sur les champs locaux. Comme la description du milieu est statistique, nous pouvons d'ores et déjà observer que la caractérisation des champs locaux le sera également.

Nous allons tenter de détailler la démarche ainsi ébauchée, en explicitant les termes entre guillemets qui caractérisent ses points clefs.

2.1.1 Représentation statistique des matériaux hétérogènes

Considérons un matériau hétérogène désordonné² d'extension Ω . Ce milieu présente une microstructure déterministe qui lui est propre et à laquelle nous pouvons avoir accès par l'observation. Mais cette masse d'informations n'est pas toujours utile dans son intégralité pour caractériser le comportement du matériau vis-à-vis de la résolution qui nous intéresse. On s'aperçoit de cette surabondance d'informations quand on considère que deux polycristaux réalisés à l'aide du même procédé d'élaboration vont avoir des comportements similaires à l'échelle macroscopique, mais des réalisations microstructurales bien différentes dans leur détail. Le filtre qui nous permet de distinguer l'information pertinente caractéristique de cette famille de matériaux, de la part d'aléa liée à une réalisation particulière de la microstructure est la description statistique.

C'est par exemple en faisant des moyennes à " p -points d'appuis" (§2.1.1.c) sur un grand nombre d'instances ω du même matériau (moyennes sur l'espace des réalisations) que nous obtiendrions une représentation statistique du matériau moyen, comme schématisé à la figure 2.1.

Cette description du "matériau moyen" est à la base de la représentation statistique des micro-structures. En fait, la définition exacte et univoque de ce matériau virtuel nécessiterait une quantité d'informations infinie (il faut calculer l'information à p -points d'appuis avec p tendant vers l'infini sur un nombre infini d'instances). Notre connaissance du matériau est donc toujours tronquée. Cette troncature est à mettre en

¹Où le champ de vitesse de déformation dans le cas viscoplastique.

²C'est-à-dire qui ne peut pas être représenté de façon déterministe, par opposition, par exemple, aux matériaux périodiques qui peuvent être définis par la donnée d'une cellule élémentaire translatée dans les directions de périodicité du matériau.

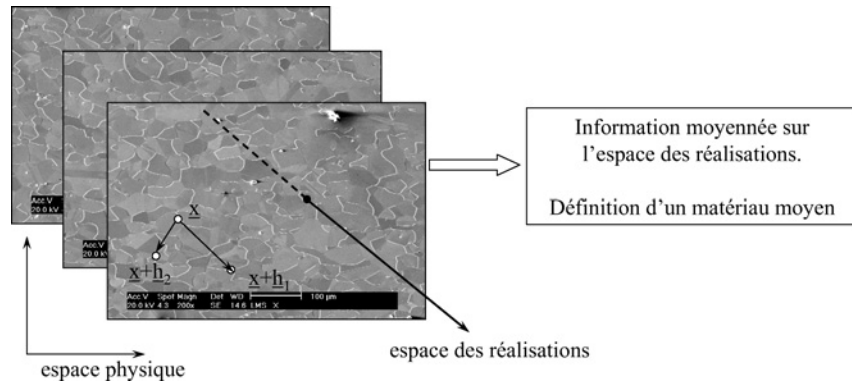


FIG. 2.1: Obtention de l'information microstructurale d'un milieu moyen.

rapport avec la résolution des phénomènes que l'on cherche à caractériser. Les méthodes d'homogénéisation présentées dans la suite nous serviront à définir des estimations ou des bornes sur le comportement de matériaux incomplètement définis, moyennant des hypothèses supplémentaires présentées dans la suite. Plus nous disposerons d'une information microstructurale précise et plus les bornes obtenues pourront être étroites³.

2.1.1.a Élément microstructural représentatif

La microstructure du matériau moyen précédent était fonction de la position (existence par exemple de zones présentant des concentrations de phases ou des tailles de grain différentes. . .), il nous faut maintenant, afin de simplifier le problème, considérer que la microstructure du matériau moyen est stationnaire, c'est-à-dire que l'information "à p -points d'appuis", définissant la microstructure moyenne, est indépendante de la position. Cette hypothèse suggère que le changement de point de calcul de l'information microstructurale peut être assimilé à une nouvelle réalisation microstructurale suivant le même schéma statistique. Nous nous placerons ainsi dans le cadre de l'hypothèse d'ergodicité qui identifie l'information statistique obtenue en un point \underline{x} donné en moyennant sur l'espace des réalisations, à l'information obtenue sur une instance du matériau en moyennant sur un domaine d'extension finie.

Tout domaine de taille suffisante pour permettre de retrouver l'information microstructurale stationnaire, à partir de telles mesures spatiales, est appelé élément microstructural représentatif (EMR). On conçoit bien, que les dimensions d'un EMR doivent être grandes devant celles des hétérogénéités considérées, afin que la moyenne spatiale intègre des configurations microstructurales suffisamment variées pour permettre de retrouver l'information stationnaire. Sous les hypothèses de stationnarité et d'ergodicité, il est clair que tout sous-domaine de Ω de taille supérieure à la taille du plus petit EMR est également un EMR, et ce, quelle que soit sa position dans Ω .

2.1.1.b Macro-homogénéité

Ce qui nous intéresse, au final, c'est de considérer qu'un EMR est un "point" macroscopique \underline{X} à l'échelle de Ω , et que le "champ macroscopique" en ce point peut être caractérisé par le champ qui se développe dans l'EMR. Imaginons que l'on impose un champ de sollicitation macroscopique sur Ω . La représentation de Ω comme un assemblage d'EMR permet de transformer le problème de structure en plusieurs problèmes liés sur des microstructures accolées (figure 2.2). Ces problèmes élémentaires sont mal posés car, si l'on connaît la sollicitation "moyenne" sur l'EMR, on ne connaît pas, par exemple, le détail des conditions de bord. Cette difficulté peut être levée en considérant que les fluctuations de conditions de bord qui pourraient être observées entre deux EMR voisins conduiraient, d'après le principe de Saint-Venant, à des perturbations des champs mécaniques localisés en peau de l'élément considéré, la taille caractéristique de cette zone perturbée étant directement liée à l'échelle des hétérogénéités. Une séparation d'échelles suffisamment drastique, entre l'EMR et les hétérogénéités locales, rendrait le volume de cette zone perturbée négligeable devant le volume de l'élément microstructural représentatif.

³C'est l'idée de la théorie systématique de Kröner.

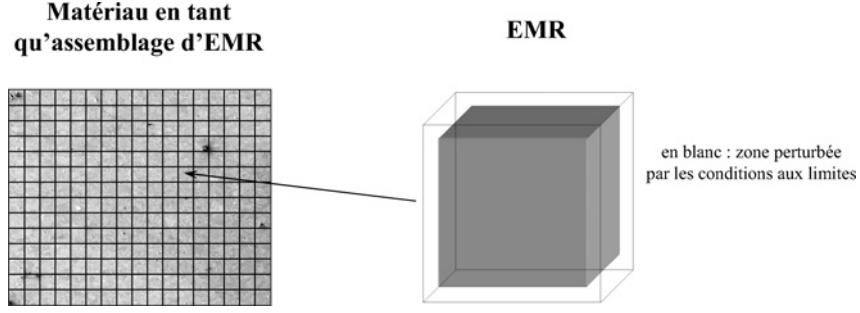


FIG. 2.2: Représentation d'un domaine en tant qu'assemblage d'EMR.

Cette hypothèse, dite hypothèse de macro-homogénéité et introduite par Hill [78], permet ainsi de s'affranchir du détail des conditions de bord auxquelles peuvent être substituées des conditions arbitraires, avec néanmoins la contrainte d'imposer au champ dans l'élément d'égaliser, en moyenne, le champ macroscopique imposé. En pratique, la taille de l'élément représentatif doit être choisie de façon à vérifier la condition de macro-homogénéité. Un EMR vérifiant les conditions de macro-homogénéité pour le chargement imposé est appelé volume élémentaire représentatif (VER) pour le problème considéré⁴.

Ainsi, les champs qui apparaissent dans le matériau hétérogène peuvent être décomposés suivant : $a(\underline{X}, \underline{x}) = \bar{a}(\underline{X}) + a'(\underline{X}, \underline{x})$, où la variable \underline{x} caractérise l'échelle microstructurale, \bar{a} se rapporte au champ macroscopique et a' aux fluctuations de moyenne nulle au sein du VER. Si Ω est sollicité de façon homogène, le problème se restreint donc à l'étude de l'effet de cette sollicitation sur un VER de Ω .

2.1.1.c Fonctions de corrélation à p -points d'appuis

D'un point de vue général, un matériau hétérogène Ω à N phases (tel celui du 2.1.1) peut être décrit par la donnée des fonctions indicatrices de ses phases $r \in \llbracket 1; N \rrbracket$ définies en tout point de Ω . Ces fonctions indicatrices $\chi^{(r)}(\underline{x}, \omega)$ sont, sans autres hypothèses, fonctions à la fois du point \underline{x} et de l'instance ω . Elles valent 1 si le point \underline{x} appartient à la phase r pour l'instance⁵ considérée et 0 sinon. Les fonctions indicatrices ont la propriété d'être, en un point donné d'une instance ω , toutes nulles sauf une (égale à 1), on en déduit donc (2.1).

$$\forall \omega \in I, \forall \underline{x} \in \Omega, \sum_r \chi^{(r)}(\underline{x}, \omega) = 1 \quad (2.1)$$

Cette propriété est liée à la continuité du matériau et à la non superposition des phases.

Dans ce même cadre général, les expressions des fonctions de corrélation à 1-, 2- et p -points sont données par les relations (2.2). Cette désignation est proche du vocabulaire utilisé en statistique [13, 128, 98, 3] mais est légèrement différente de celle utilisée dans le domaine de la géométrie stochastique et de la morphologie mathématique [141, 92, 36], où l'on parle plutôt de fonctions de covariance pour des expressions proches de celles des fonctions de corrélation à deux points.

$$\forall r_1 \in \llbracket 1, N \rrbracket, \forall \underline{x}_1 \in \Omega, \quad c^{r_1}(\underline{x}_1) = \left\langle \chi^{(r_1)}(\underline{x}_1, \omega) \right\rangle_{I_\omega} \quad (2.2a)$$

$$\forall (r_1, r_2) \in \llbracket 1, N \rrbracket^2, \forall (\underline{x}_1, \underline{x}_2) \in \Omega^2, \quad C^{r_1 r_2}(\underline{x}_1, \underline{x}_2) = \left\langle \chi^{(r_1)}(\underline{x}_1, \omega) \chi^{(r_2)}(\underline{x}_2, \omega) \right\rangle_{I_\omega} \quad (2.2b)$$

\vdots

$$\forall i \leq p, r_i \in \llbracket 1, N \rrbracket, \underline{x}_i \in \Omega, \quad C^{r_1 \dots r_p}(\underline{x}_1, \dots, \underline{x}_p) = \left\langle \prod_{i=1}^p \chi^{(r_i)}(\underline{x}_i, \omega) \right\rangle_{I_\omega} \quad (2.2c)$$

où l'opération

$$\langle \bullet \rangle_{I_\omega} = \frac{1}{|I|} \int_I \bullet \, dI_\omega \quad (2.3)$$

⁴La taille du VER dépend du type de comportement considéré et les situations de forts gradients de sollicitations posent problème (voir par exemple [20, 215]).

⁵L'ensemble des réalisations de microstructures est noté I .

désigne la moyenne d'une fonction sur l'espace I de mesure $|I|$, vis-à-vis de la variable ω . Lorsqu'aucune confusion n'est possible sur l'espace et la variable considérés ces informations ne seront pas spécifiées afin d'alléger l'écriture.

Dans toute la suite, nous nous placerons dans le cadre des hypothèses de stationnarité et d'ergodicité, et nous restreindrons l'intégration sur un EMR⁶, ce qui conduit à réécrire ces fonctions de corrélation sous la forme (2.4). Une représentation schématique du calcul des fonctions de corrélation est proposée figure 2.3.

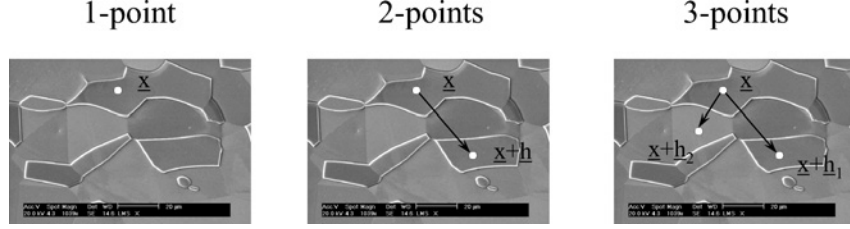


FIG. 2.3: Le calcul des fonctions de corrélation se fait en déplaçant le point \underline{x} , sans faire varier les vecteurs et à comptabiliser l'aire pour laquelle le produit des fonctions indicatrices vaut 1 ramené à la surface totale de l'élément. (Il est à noter que cette mesure doit être menée sur un EMR, ce qui n'est pas le cas des surfaces présentées ici.)

$$\forall r_1 \in \llbracket 1, N \rrbracket, \quad c^{r_1} = \left\langle \chi^{(r_1)}(\underline{x}) \right\rangle_{\text{EMR}_{\underline{x}}} \quad (2.4a)$$

$$\forall (r_1, r_2) \in \llbracket 1, N \rrbracket^2, \forall \underline{h}_2, \quad C^{r_1 r_2}(\underline{h}_2) = \left\langle \chi^{(r_1)}(\underline{x}) \chi^{(r_2)}(\underline{x} + \underline{h}_2) \right\rangle_{\text{EMR}_{\underline{x}}} \quad (2.4b)$$

⋮

$$\forall i \leq p, \quad r_i \in \llbracket 1, N \rrbracket, \quad \forall \underline{h}_i, \quad C^{r_1 \dots r_p}(\underline{h}_2, \dots, \underline{h}_p) = \left\langle \chi^{(r_1)}(\underline{x}) \prod_{i=2}^p \chi^{(r_i)}(\underline{x} + \underline{h}_i) \right\rangle_{\text{EMR}_{\underline{x}}} \quad (2.4c)$$

Nous pouvons énoncer directement quelques propriétés élémentaires de ces fonctions. Tout d'abord la donnée de la fonction de corrélation à p -points d'appui permet de déterminer toutes les fonctions de corrélation à p' -points d'appui avec $p' < p$. En effet, cette affirmation se vérifie en considérant l'équation (2.5) qui met à profit la relation élémentaire (2.1).

$$\forall \underline{h}_2, \dots, \underline{h}_p, \quad C^{r_1 r_2 \dots r_{p-1}}(\underline{h}_2, \dots, \underline{h}_{p-1}) = \sum_{r_p} \langle \chi^{r_1}(\underline{x}) \chi^{r_2}(\underline{x} + \underline{h}_2) \dots \chi^{r_p}(\underline{x} + \underline{h}_p) \rangle_{\text{EMR}_{\underline{x}}} \quad (2.5)$$

Cette propriété nous permet de nous limiter aux fonctions à p -points d'appui pour définir l'information d'ordre p^7 . D'autres propriétés nous permettent encore de restreindre le nombre de fonctions à définir pour obtenir l'information d'ordre p . En effet, les relations (2.6) traduisent la non indépendance des N^p fonctions à p -points d'appui.

$$C^{r_1 \dots r_i \dots r_j \dots r_p}(\underline{h}_2, \dots, \underline{h}_i, \dots, \underline{h}_j, \dots, \underline{h}_p) = C^{r_1 \dots r_j \dots r_i \dots r_p}(\underline{h}_2, \dots, \underline{h}_j, \dots, \underline{h}_i, \dots, \underline{h}_p) \quad (2.6a)$$

$$= C^{r_i \dots r_1 \dots r_j \dots r_p}(\underline{h}_2 - \underline{h}_i, \dots, -\underline{h}_i, \dots, \underline{h}_j - \underline{h}_i, \dots, \underline{h}_p - \underline{h}_i) \quad (2.6b)$$

$$\sum_{\substack{r_i \\ i \in \llbracket 1, p \rrbracket \\ i \neq j}} C^{r_1 \dots r_2 \dots r_p}(\underline{h}_2, \dots, \underline{h}_p) = c^{r_j} \quad (2.6c)$$

La relation (2.6c) n'est que l'application répétée de la propriété (2.5). En supposant les fractions volumiques (2.4a) connues, elle définit N relations entre les fonctions de corrélation. (2.6a) et (2.6b), quant à elles, se retrouvent à l'aide d'un graphe ou en considérant la définition des fonctions de corrélation à

⁶EMR $_{\underline{x}}$ désignant l'ensemble des points d'un EMR centré en \underline{x} .

⁷Par information d'ordre p , nous entendons la connaissance de toutes les fonctions de corrélation à p' -points d'appui avec $p' < p$.

p -points (2.4c) et l'hypothèse de stationnarité autorisant tout changement de variable issu d'une translation. Les seules permutations présentées en (2.6a) et (2.6b) permettant de réduire le nombre de fonctions à définir sont liées à des cas où l'on échange des phases de nature différente ($r_i \neq r_j$). Dans le cas contraire, elles définissent des relations de symétrie sur les fonctions de corrélation restantes. Plutôt que de rechercher le nombre total de relations induites par (2.6a) et (2.6b), il est plus simple de remarquer que ces relations permettent de ramener toute fonction de corrélation à une fonction "à exposants ordonnés", c'est-à-dire telle que $C^{r_1 \dots r_i \dots r_p}$ avec $r_1 \leq r_i \leq r_p$ pour tout i . Le nombre de fonctions de corrélation restantes, après la prise en compte de ces propriétés, est égal au nombre de telles fonctions ordonnées qui peut s'exprimer sous la forme d'une combinaison avec répétition. Le nombre de fonctions de corrélation à p -points indépendantes lorsque l'on considère un milieu à N phases est donc inférieur ou égal à :

$$\Gamma_N^p - N = \mathcal{C}_{p+N-1}^p - N = \frac{(p+N-1)!}{(N-1)!(p)!} - N \quad (2.7)$$

où le " $-N$ " est lié à la condition (2.6c).

Les relations liées à l'application des équations (2.6a) et (2.6b) dans le cas où les r_i, r_j permutés sont égaux conduisent à des contraintes de symétrie qui sont d'autant plus nombreuses que le cardinal de l'ensemble $\{r_1, \dots, r_p\}$ est faible; elles sont donc maximales pour les fonctions d'auto-corrélation.

On remarquera, au passage, que si $\underline{h}_i = \underline{h}_j$ avec $i \neq j$ pour $r_i \neq r_j$ la fonction de corrélation est toujours nulle d'après la condition de non superposition des phases, si au contraire $r_i = r_j$ alors la fonction de corrélation considérée correspond à la fonction de corrélation à "un point de moins".

Ces propriétés sont de peu d'intérêt pratique du fait de la difficulté à obtenir les fonctions de corrélation à p -points d'appui. En pratique, on se limite en général aux covariances (fonctions de corrélations à 2 points).

D'autres propriétés individuelles des fonctions de corrélation à p -points peuvent être obtenues en considérant des \underline{h} de norme très petite ou de norme grande. Par souci de clarté, ces propriétés ne seront exprimées, ici, que pour les fonctions à deux points. Lorsque la norme de \underline{h} tend vers 0 ($\underline{x} + \underline{h} \rightarrow \underline{x}$), on retrouve le phénomène d'indépendance vis-à-vis du point d'appui (si $r_1 = r_2$) ou la nullité de la fonction de corrélation (si $r_1 \neq r_2$). Dans le cas de la covariance, ces considérations s'écrivent :

$$\lim_{\|\underline{h}\| \rightarrow 0} C^{r_1 r_2}(\underline{h}) = c^{r_1} \delta_{r_1 r_2} \quad (2.8)$$

Dans le cas où la norme de \underline{h} devient grande, on supposera la perte de corrélation du matériau (absence d'ordre à grande distance). Lorsque cette hypothèse s'applique, elle permet de factoriser la fonction de corrélation à p -points en i fonctions de corrélation à p_i -points d'appui avec $p = \sum_i p_i$ ce type de factorisation est brièvement discuté, par exemple, dans [13, 128] et [129]. La seule factorisation possible dans le cas à deux points est donnée par la relation suivante :

$$\lim_{\|\underline{h}\| \rightarrow +\infty} C^{r_1 r_2}(\underline{h}) = c^{r_1} c^{r_2} \quad (2.9)$$

On pourrait considérer encore d'autres relations sur les fonctions de corrélation, sur le modèle de la relation (2.6c), en considérant connues d'autres informations sur la microstructure. L'analyse statistique de microstructures peut nous fournir de tels ingrédients. On pensera notamment à la relation introduite par [44] pour les microstructures isotropes puis généralisée respectivement aux biphasés anisotropes par [15] et aux microstructures multiphasées anisotropes par [68]. Cette relation est donnée en (2.10) et lie la fonction de corrélation moyennée suivant toutes les orientations⁸ à la mesure de surface par unité de volume S_V séparant les phases r_i et r_j qui est une mesure classique, issue de la stéréologie. La démonstration de cette relation repose sur une généralisation dans l'espace de la procédure de "l'aiguille de Buffon", où l'on considère le nombre de changements de phase pour un vecteur infinitésimal d'orientation donnée.

$$\lim_{\|\underline{h}\| \rightarrow 0} \left[\frac{\langle C^{r_i r_j}(\underline{h}) \rangle_{\Xi}}{\|\underline{h}\|} \right] = \frac{\partial \langle C^{r_i r_j}(\underline{h}) \rangle_{\Xi}}{\partial \|\underline{h}\|} \Big|_{\|\underline{h}\|=0} = \frac{[S_V]_{ij}}{4} \quad (2.10)$$

Cette relation peut être utile lorsque l'on souhaite modéliser la fonction de corrélation en lui donnant une forme explicite comme dans [35] par exemple, car elle impose alors des contraintes⁹ qui doivent être

⁸En écrivant $\underline{h} = \|\underline{h}\| \underline{n}$, le terme $\langle f(\underline{h}) \rangle_{\Xi}$ désigne la moyenne de f à $\|\underline{h}\|$ fixée mais pour \underline{n} décrivant uniformément la sphère unité.

⁹ $\frac{\partial \langle C^{r_i r_j}(\underline{h}) \rangle_{\Xi}}{\partial \|\underline{h}\|} \Big|_{\|\underline{h}\|=0}$ doit être finie mais strictement positive.

vérifiées par une telle fonction. Ce type de relation est vérifié, par construction, lorsque l'on génère une microstructure à partir de schémas statistiques complètement définis comme dans [92, 141, 186]. L'application de la description en terme de fonctions de corrélation à la microstructure des polycristaux sera évoquée au §2.2.1 ; les choix spécifiques effectués dans le cadre des polycristaux biphasés seront présentés au chapitre 3.

2.1.2 Passage d'une échelle à une autre

Après avoir présenté quelques hypothèses et outils de représentation d'un milieu hétérogène, il nous faut maintenant éclaircir les notions de "moyenne" et de "localisation" permettant le passage du comportement local au comportement macroscopique.

Dans toute la suite Ω désignera un VER.

2.1.2.a Définition intuitive des champs macroscopiques

Si l'on se donne les champs mécaniques dans le VER, les champs macroscopiques résultants, associés à ce point macroscopique seraient ceux que l'on "mesurerait" en appliquant un extensomètre sur le VER ou en analysant les résultantes des forces qu'il applique sur son contour au reste du milieu par principe d'action-réaction. Ainsi, le comportement macroscopique est associé aux conditions de bord moyennes liées aux champs mécaniques se développant dans son volume. Par exemple, en considérant un domaine parallélépipédique pour simplifier, les composantes diagonales du tenseur des déformations macroscopiques sont données, dans l'hypothèse des petites déformations, par le rapport \bar{u}_i/L_i , où \bar{u}_i est le déplacement relatif moyen dans la direction i pour les éléments de surfaces S_i orientés suivant i , et où L_i est la dimension initiale du VER dans cette direction, ce qui se réécrit comme l'équation (2.11). Cette expression lie clairement la définition intuitive de la déformation macroscopique, $\underline{\underline{E}}$, à la moyenne du champ de déformation dans le VER $\langle \underline{\underline{\varepsilon}} \rangle$.

$$E_{ii} = \frac{\bar{u}_i}{L_i} = \frac{1}{|S_i| L_i} \int_{S_i} u_i(\underline{x}) n_i(\underline{x}) dS_{\underline{x}} = \frac{1}{|\Omega|} \int_{\partial\Omega} u_i(\underline{x}) n_i(\underline{x}) dS_{\underline{x}} = \left\langle \frac{\partial u_i}{\partial x_i} \right\rangle_{\Omega_{\underline{x}}} = \langle \varepsilon_{ii}(\underline{x}) \rangle \quad (2.11)$$

Elle se généralise facilement aux termes non diagonaux en se rappelant que, pour i différent de j , E_{ij} est égale au demi-glissement entre les vecteurs de base \underline{e}_i et \underline{e}_j soit $2E_{ij} = \bar{u}_j/L_i + \bar{u}_i/L_j$. Au final, ces expressions consistent à écrire une relation de Gauss classique (2.12).

$$\underline{\underline{E}} = \frac{1}{2|\Omega|} \int_{\Omega} (\underline{u} \otimes \underline{n} + \underline{n} \otimes \underline{u}) dV_{\underline{x}} = \langle \underline{\underline{\varepsilon}} \rangle \quad (2.12)$$

Le cas des contraintes est plus difficile à visualiser, mais comme nous travaillons dans une situation macro-homogène, on peut supposer que l'état mécanique dans le VER résulte de conditions en contraintes imposées et que la contrainte moyenne est obtenue en considérant un vecteur contrainte sur le contour qui peut être associé à une contrainte homogène $\underline{\underline{\sigma}}_0$. En considérant l'équation d'équilibre et une identité de Gauss, on montre que $\underline{\underline{\sigma}}_0$ doit alors être prise égale à $\langle \underline{\underline{\sigma}} \rangle$.

$$\langle \sigma \rangle_{ij} = \frac{1}{|\Omega|} \int_{\partial\Omega} \sigma_{ik} x_j n_k dS_{\underline{x}} \quad (2.13a)$$

$$= \frac{\sigma_{ik}^0}{|\Omega|} \int_{\partial\Omega} x_j n_k dS_{\underline{x}} = \sigma_{ij}^0 \quad (2.13b)$$

Cette condition de bord traduit l'effort que subit le milieu extérieur du fait du VER, c'est donc la contrainte macroscopique. Ainsi, les champs mécaniques macroscopiques se déduisent des champs qui se développent au sein du VER par une opération de moyenne.

Si les conditions de bord importent peu, les bilans énergétiques dans les situations de sollicitations homogènes au bord, ainsi que pour toutes les situations faisant intervenir des conditions aux limites plus complexes mais associées au même état macroscopique, doivent être identiques. Cette idée est la traduction du lemme de Hill (2.14), vrai dès que deux champs de contrainte et de déformation admissibles, non nécessairement liés par une loi de comportement, sont associés dans un cadre macro-homogène.

$$\langle \underline{\underline{\sigma}}(\underline{x}) : \underline{\underline{\varepsilon}}(\underline{x}) \rangle = \langle \underline{\underline{\sigma}} \rangle : \langle \underline{\underline{\varepsilon}} \rangle = \underline{\underline{\Sigma}} : \underline{\underline{E}} \quad (2.14)$$

Cette égalité peut être obtenue dans le cas de conditions de chargement homogènes au contour en utilisant les relations de passages classiques intégrales de volumes/intégrales de contour [215, 209, 159]. Dans un cadre plus général, pour des sollicitations arbitraires mais respectant la macro-homogénéité, ce résultat peut également être obtenu [22, 20, 21]. Pour parvenir à ce résultat on décompose le chargement en partie fluctuante de moyenne nulle et partie homogène, ainsi par exemple en déformation imposée au bord on écrit :

$$\forall \underline{x} \in \partial\Omega, \quad \underline{u}(\underline{x}) = \underline{E} \cdot \underline{x} + \underline{u}'(\underline{x}) \quad (2.15)$$

Notons $\underline{\varepsilon}'_0(\underline{x})$ le champ solution du problème d'élasticité linéaire pour $\underline{u}'(\underline{x})$ imposé au bord d'un matériau homogène de module \mathbb{C}^0 . Le champ $\underline{\varepsilon}(\underline{x}) - \underline{\varepsilon}'_0(\underline{x})$ est cinématiquement admissible pour des déformations homogènes au bord, la relation de Hill s'applique donc et on obtient :

$$\langle \underline{\sigma}(\underline{x}) : (\underline{\varepsilon}(\underline{x}) - \underline{\varepsilon}'_0(\underline{x})) \rangle = \langle \underline{\sigma}(\underline{x}) \rangle : \langle \underline{\varepsilon}(\underline{x}) - \underline{\varepsilon}'_0(\underline{x}) \rangle = \underline{\Sigma} : \underline{E} \quad (2.16)$$

Le chargement respectant la condition de macro-homogénéité, le champ $\underline{\varepsilon}'_0(\underline{x})$ associé à $\underline{u}'(\underline{x})$ est localisé en peau de Ω et le volume de cette zone est négligeable devant $|\Omega|$. Ainsi $\langle \underline{\sigma} : \underline{\varepsilon}'_0(\underline{x}) \rangle$ est négligeable devant $\langle \underline{\sigma} : \underline{\varepsilon}(\underline{x}) \rangle$ ce qui permet d'identifier (2.16) à (2.14). Le lemme de Hill (2.14) est donc de validité générale pour tout VER¹⁰. Le bilan énergétique macroscopique se déduit donc également des bilans locaux.

Ce passage du microscopique au macroscopique est donc assez simple, ce qui est compréhensible dans la mesure où l'on part d'un champ de tenseurs pour déterminer un tenseur ; on va donc plutôt d'une information complexe vers une information simple. Cette observation permet également de comprendre que les difficultés réelles vont apparaître lors de l'opération inverse consistant à passer de l'échelle macroscopique à l'échelle microscopique.

2.1.2.b Méthode de localisation : calcul de microstructures

L'opération de localisation s'apparente à un calcul de (micro)structure sur le VER. Un problème d'élasto-statique (non linéaire) sur un milieu hétérogène s'écrit sous forme forte (ou locale) au travers des équations suivantes :

$$\underline{\underline{\sigma}} = \frac{\partial w}{\partial \underline{\underline{\varepsilon}}} \quad (2.17a)$$

$$\nabla \cdot \underline{\underline{\sigma}} + \underline{b} = 0 \quad \text{sur } \Omega \quad (2.17b)$$

$$\underline{\underline{\sigma}} \cdot \underline{n} = \underline{T}^d \quad \text{sur } \partial\Omega^T \quad (2.17c)$$

$$\underline{\underline{\varepsilon}} = \frac{1}{2} (\nabla \otimes \underline{u} + \underline{u} \otimes \nabla) \quad \text{sur } \Omega \quad (2.17d)$$

$$\underline{u} = \underline{u}^d \quad \text{sur } \partial\Omega^u \quad (2.17e)$$

Dans ces expressions, l'exposant d désigne les champs imposés par l'extérieur et $\partial\Omega^T$ et $\partial\Omega^u$ établissent une partition du contour $\partial\Omega$ sur laquelle, respectivement, le vecteur contrainte et le déplacement sont imposés¹¹.

Les équations (2.17b) et (2.17c) constituent avec les hypothèses de régularité (champ continu et continûment différentiable par morceaux¹² [176] §8.4.2) les conditions d'admissibilité statique pour le champ de contraintes de Cauchy, $\underline{\underline{\sigma}} \in \mathcal{S}(\underline{b}, \partial\Omega^T, \underline{T}^d)$ en présence d'une densité de force¹³ \underline{b} . De même, (2.17e) et l'hypothèse de continuité de ce champ définissent les conditions d'admissibilité cinématique du déplacement, $\underline{u} \in \mathcal{C}(\partial\Omega^u, \underline{u}^d)$. L'équation (2.17d) définit la déformation dans l'hypothèse des petites perturbations et (2.17a) établit la relation de comportement élastique non linéaire. On note w la densité d'énergie potentielle élastique qui doit être une fonction strictement convexe de $\underline{\underline{\varepsilon}}$ afin d'assurer la stabilité isotherme du matériau. Cette propriété permet d'associer à w son dual convexe $u = w^*$ à l'aide de la transformation

¹⁰En ce sens, cette relation peut nous fournir un critère "d'homogénéisabilité" pour un élément de matière dont l'énergie est indépendante du détail des conditions de bord qui lui sont appliquées, on parle alors de condition de macro-homogénéité de Hill-Mandel.

¹¹Ces conditions au bord ne sont pas les plus générales, il suffit en fait qu'en tout point du bord des composantes complémentaires du vecteur contrainte et du déplacement soient imposées.

¹²Ce choix conduit à interpréter l'opérateur divergence au sens des distributions.

¹³Dans toute la suite nous considérerons le champ de contrainte auto-équilibré ($\underline{b} = 0$).

de Legendre-Fenchel convexe (annexe B). Nous considérerons dans un premier temps des comportements linéaires et donc un potentiel quadratique de la forme $w(\underline{\underline{\varepsilon}}) = 1/2 \mathbb{C}(\underline{\underline{x}}) :: (\underline{\underline{\varepsilon}} \otimes \underline{\underline{\varepsilon}})$.

Dans le cas macro-homogène, les conditions d'admissibilité des champs mécaniques se réécriront (2.18a) en déformation macroscopique imposée et (2.18b) en contrainte macroscopique imposée, les mêmes conditions de régularité que précédemment étant imposées sur ces champs.

$$\mathcal{C}^m(\underline{\underline{E}}) = \left\{ \underline{\underline{\varepsilon}}(\underline{\underline{x}}) \mid \underline{\underline{\varepsilon}} = \frac{1}{2}(\nabla \otimes \underline{\underline{u}} + \underline{\underline{u}} \otimes \nabla), \langle \underline{\underline{\varepsilon}} \rangle = \underline{\underline{E}} \right\} \quad \mathcal{S}^m = \{ \underline{\underline{\sigma}}(\underline{\underline{x}}) \mid \nabla \cdot \underline{\underline{\sigma}} = 0 \} \quad (2.18a)$$

$$\mathcal{S}^m(\underline{\underline{\Sigma}}) = \{ \underline{\underline{\sigma}}(\underline{\underline{x}}) \mid \nabla \cdot \underline{\underline{\sigma}} = 0, \langle \underline{\underline{\sigma}} \rangle = \underline{\underline{\Sigma}} \} \quad \mathcal{C}^m = \left\{ \underline{\underline{\varepsilon}}(\underline{\underline{x}}) \mid \underline{\underline{\varepsilon}} = \frac{1}{2}(\nabla \otimes \underline{\underline{u}} + \underline{\underline{u}} \otimes \nabla) \right\} \quad (2.18b)$$

Ce problème peut être abordé en utilisant la technique des opérateurs de Green. Cette méthode consiste à rechercher une solution formelle de l'équation de Navier. Dans cette section, nous allons rappeler rapidement quelques résultats élémentaires nécessaires pour la suite.

Dans le cas d'un milieu homogène de comportement \mathbb{C}^0 , les équations locales de l'élasto-statique (2.17) permettent d'obtenir simplement l'équation de Navier (2.19) où $\underline{\underline{u}}(\underline{\underline{x}})$ est le champ de déplacement solution du problème (sous la condition d'admissibilité cinématique) et où $\underline{\underline{\tau}}(\underline{\underline{x}})$ est un champ de polarisation lié, par exemple, à des précontraintes au sein du matériau.

$$\nabla \cdot [\mathbb{C}^0 : (\nabla \otimes \underline{\underline{u}}) + \underline{\underline{\tau}}] = 0 \quad (2.19a)$$

$$\nabla \cdot [\mathbb{C}^0 : (\nabla \otimes \underline{\underline{u}})] + \nabla \cdot \underline{\underline{\tau}} = 0 \quad (2.19b)$$

C'est à ce problème, qui peut être vu comme un problème de thermo-élasticité ou d'élasticité pour un milieu comprenant des zones plastifiées, que l'on sait répondre de façon formelle à l'aide des opérateurs de Green dits "modifiés". Dans le cas d'un milieu hétérogène, on peut également s'y ramener en considérant l'égalité (2.20), où \mathbb{C}^0 est maintenant un milieu de référence et où la polarisation traduit la différence de réponse locale par rapport à cette référence.

$$\forall \underline{\underline{\varepsilon}}, \quad \mathbb{C}(\underline{\underline{x}}) : \underline{\underline{\varepsilon}}(\underline{\underline{x}}) = \mathbb{C}^0 : \underline{\underline{\varepsilon}}(\underline{\underline{x}}) + \underline{\underline{\tau}}(\underline{\underline{x}}) \quad (2.20)$$

La méthode des opérateurs de Green permet de résoudre de façon systématique ce type de problème. Dans un cadre macro-homogène la solution formelle du problème s'écrit [211, 20, 22] :

$$\underline{\underline{\varepsilon}}(\underline{\underline{x}}) - \underline{\underline{E}} = - \int_{\Omega} \mathbb{F}^0(\underline{\underline{x}} - \underline{\underline{y}}) : [\underline{\underline{\tau}}(\underline{\underline{y}}) - \underline{\underline{\tau}}] dV_{\underline{\underline{y}}} \quad \text{avec} \quad \underline{\underline{\tau}} = \langle \underline{\underline{\tau}}(\underline{\underline{x}}) \rangle_{\Omega_{\underline{\underline{x}}}} = \langle (\mathbb{C}(\underline{\underline{x}}) - \mathbb{C}^0) : \underline{\underline{\varepsilon}}(\underline{\underline{x}}) \rangle_{\Omega_{\underline{\underline{x}}}} \quad (2.21)$$

et où \mathbb{F}^0 est l'opérateur de Green modifié en déformation [23]. Néanmoins, les solutions obtenues n'ont d'expression analytique que pour des cas rares.

Le résultat sans doute le plus important dérivé de cette méthodologie est le résultat d'Eshelby [55]. Pour un milieu élastique homogène infini, présentant une déformation nulle à l'infini, de comportement \mathbb{C}^0 et comprenant un domaine ellipsoïdal de polarisation homogène $\underline{\underline{\tau}}$ (figure 2.4), ce théorème affirme qu'on voit apparaître dans la zone polarisée des champs mécaniques homogènes $\underline{\underline{\varepsilon}}$ et $\underline{\underline{\sigma}}$ qui peuvent être exprimés à l'aide du tenseur d'Eshelby \mathbb{S}^E .

$$\underline{\underline{\varepsilon}} = -\mathbb{S}^E : (\mathbb{C}^0)^{-1} : \underline{\underline{\tau}} = -\mathbb{P}^0 : \underline{\underline{\tau}} \quad (2.22a)$$

$$\underline{\underline{\sigma}} = (\mathbb{I} - \mathbb{C}^0 : \mathbb{P}^0) : \underline{\underline{\tau}} \quad (2.22b)$$

Le tenseur \mathbb{P}^0 introduit ici est le tenseur de Hill [77]. Il permet tout comme le tenseur d'Eshelby de lier champs mécaniques et polarisations, mais celui-ci présente des propriétés plus intéressantes (on notera par exemple qu'il est symétrique et défini-positif [22]) et apparaît dans les calculs de façon plus naturelle du fait de l'identité (2.23), où Φ désigne un domaine ellipsoïdal de forme donnée mais de taille arbitraire [211, 23, 159, 20, 215].

$$\mathbb{P}_{\Phi}^0 = \int_{\Phi} \mathbb{F}^0(\underline{\underline{y}}) dV_{\underline{\underline{y}}} \quad (2.23)$$

\mathbb{P}_{Φ}^0 dépend du comportement du milieu de référence \mathbb{C}^0 et de la forme de Φ , cette dernière dépendance sera implicite dans toute la suite. On écrira donc que la déformation dans une inclusion de polarisation homogène $\underline{\underline{\tau}}$ et soumise à l'infini à une déformation macroscopique $\underline{\underline{E}}$ s'exprime par :

$$\underline{\underline{\varepsilon}} = \underline{\underline{E}} - \mathbb{P}^0 : \underline{\underline{\tau}} \quad (2.24)$$

Ce résultat a été obtenu dans le cas d'une polarisation homogène dans Φ , non nécessairement liée à un problème d'inhomogénéité. Dans la situation où le domaine polarisé est, en fait, une inclusion homogène de comportement \mathbb{C}^1 (figure 2.4), le théorème d'Eshelby peut s'appliquer en remarquant que, si la polarisation due à l'inclusion est supposée homogène, alors le champ de déformation de celle-ci le sera également, ce

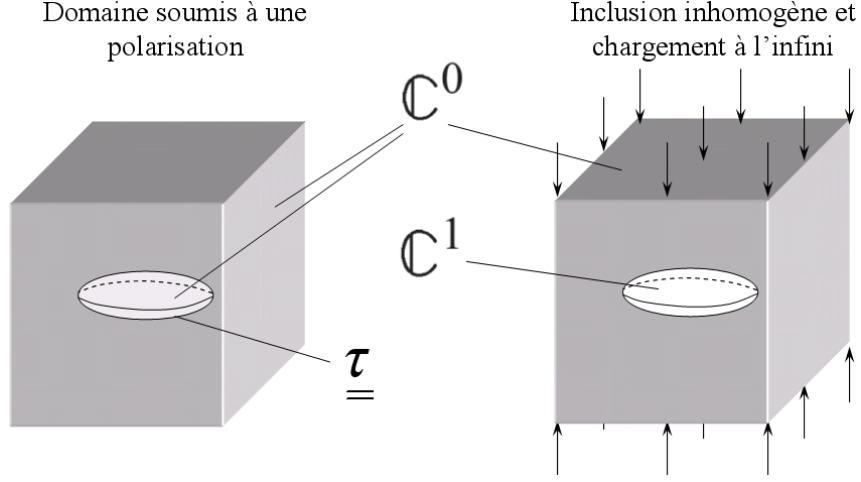


FIG. 2.4: Schématisation des deux problèmes d'inclusion évoqués, la matrice étant considérée comme infinie.

qui permet de vérifier que les conditions d'application du théorème sont bien vérifiées¹⁴. Le champ dans l'inclusion, obtenu en soumettant le milieu infini à la déformation macroscopique $\underline{\underline{E}}$, est donné par (2.25).

$$\underline{\underline{\varepsilon}} = [\mathbb{I} + \mathbb{P}^0 : (\mathbb{C}^1 - \mathbb{C}^0)]^{-1} : \underline{\underline{E}} \quad (2.25a)$$

$$= [\mathbb{C}^* + \mathbb{C}^1]^{-1} : (\mathbb{C}^* + \mathbb{C}^0) : \underline{\underline{E}} \quad \text{avec } \mathbb{C}^* = (\mathbb{P}^0)^{-1} - \mathbb{C}^0 = \mathbb{C}^0 : [(\mathbb{S}^E)^{-1} - \mathbb{I}] \quad (2.25b)$$

Cette relation s'obtient en considérant (2.24) et la définition de $\underline{\underline{\tau}}$ donnée précédemment. Le résultat de "l'inhomogénéité" d'Eshelby permet de modéliser de façon directe la situation où le matériau est constitué d'inclusions ellipsoïdales (de mêmes formes et orientations) en faible concentration. Mais d'autres applications de cette relation sont également possibles, en utilisant la notion fructueuse de problème d'inclusions formel qui permettra une réécriture de la formulation variationnelle classique pour aboutir à la formulation variationnelle de Hashin et Shtrikman.

L'extension des problèmes d'inclusion précédents au cas d'une inclusion formelle consiste à remarquer que l'utilisation de (2.21) dans le cas d'un champ de polarisation homogène par phase s'écrit (2.26)

$$\underline{\underline{\varepsilon}}(\underline{y}) = \underline{\underline{E}} - \sum_r \left[\int_{\text{VER}(\underline{y})} \mathbb{T}^0(\underline{y} - \underline{x}) \left(\chi^{(r)}(\underline{x}) - c^r \right) dV_{\underline{x}} : \underline{\underline{\tau}}^{(r)} \right] \quad (2.26)$$

et, qu'à partir de cette expression et de la définition des fonctions de corrélation¹⁵, on peut obtenir une formule (2.27d) caractérisant non plus un champ homogène dans un domaine de forme donné, mais un

¹⁴En utilisant l'unicité de la solution d'un problème d'élasticité linéaire.

¹⁵En utilisant également la parité de l'opérateur \mathbb{T}^0 [23].

champ moyen $\underline{\underline{\varepsilon}}^{(s)}$ dans un domaine de polarisation homogène :

$$\underline{\underline{\varepsilon}}^{(s)} = \underline{\underline{E}} - \frac{1}{c^s |\Omega|} \sum_r \left[\int_{\text{VER}(\underline{z})} \int_{\text{VER}(\underline{y})} \mathbb{F}^0(\underline{y} - \underline{x}) \chi^{(s)}(\underline{y}) \left(\chi^{(r)}(\underline{x}) - c^r \right) dV_{\underline{x}} dV_{\underline{y}} : \underline{\underline{\tau}}^{(r)} \right] \quad (2.27a)$$

$$= \underline{\underline{E}} - \frac{1}{c^s} \sum_r \left[\int_{\text{VER}(0)} \frac{1}{|\Omega|} \int_{\text{VER}(\underline{z})} \chi^{(s)}(\underline{y}) \left(\chi^{(r)}(\underline{y} + \underline{h}) - c^r \right) dV_{\underline{y}} \mathbb{F}^0(-\underline{h}) dV_{\underline{h}} : \underline{\underline{\tau}}^{(r)} \right] \quad (2.27b)$$

$$= \underline{\underline{E}} - \frac{1}{c^s} \sum_r \left[\int_{\text{VER}(0)} (C^{sr}(\underline{x}) - c^s c^r) \mathbb{F}^0(\underline{h}) dV_{\underline{h}} : \underline{\underline{\tau}}^{(r)} \right] \quad (2.27c)$$

$$= \underline{\underline{E}} - \sum_r \mathbb{P}^{(sr)} : \underline{\underline{\tau}}^{(r)} \quad (2.27d)$$

Dans le cas où les fonctions de corrélation à deux points intervenant dans l'expression (2.27d) présentent toutes¹⁶ la même "symétrie ellipsoïdale" [210, 211] présentée en (2.28), on peut rapprocher [210, 159] le tenseur $\mathbb{P}^{(sr)}$ du tenseur de Hill introduit précédemment dans le cas d'une inclusion ellipsoïdale (2.29).

$$C^{rs}(\underline{h}) = C^{rs}(\|\underline{\underline{Z}}\underline{\underline{h}}\|) \quad (2.28)$$

$$\mathbb{P}^{(sr)} = (\delta_{sr} - c^r) \mathbb{P}^0 \quad (2.29)$$

La symétrie ellipsoïdale et la forme de l'inclusion sont associées à un tenseur $\underline{\underline{Z}}$, dit tenseur microstructural, lié à un ellipsoïde de surface homothétique à $S_Z = \{\underline{x} \mid \underline{x} \underline{\underline{Z}}^T \underline{\underline{Z}} \underline{x} = 1\}$ où ^T désigne la transposition. Dans ce cas particulier, en réarrangeant les termes de l'équation (2.27d) et en imposant la relation (2.20), non pas en tout point mais seulement en moyenne sur les phases¹⁷, on obtient (2.30) qui est similaire à l'expression (2.25).

$$\forall r, \left(\mathbb{C}^* + \mathbb{C}^{(r)} \right) : \underline{\underline{\varepsilon}}^{(r)} = (\mathbb{C}^* + \mathbb{C}^0) : \underline{\underline{\varepsilon}}_r^0 \quad (2.30a)$$

$$\underline{\underline{\varepsilon}}_r^0 = \frac{1}{1 - c^r} \sum_{s \neq r} c^s \left[\mathbb{I} - \mathbb{P}^0 : (\mathbb{C}^{(s)} - \mathbb{C}^0) \right] : \underline{\underline{\varepsilon}}^{(s)} \quad (2.30b)$$

Cette relation permet d'identifier le champ moyen $\underline{\underline{\varepsilon}}^{(r)}$ à la déformation uniforme apparaissant dans une inclusion ellipsoïdale entourée d'une matrice, constituée du milieu de référence \mathbb{C}^0 , soumise à une sollicitation $\underline{\underline{\varepsilon}}_r^0$ à l'infini. On voit donc ici le lien qui peut exister entre ce problème en polarisation homogène et le problème d'inclusion évoqué précédemment. C'est à ce lien qu'il est fait référence en évoquant un problème d'inclusion fictif (ou formel), dans lequel n'existe, en général, aucune inclusion réelle.

On peut remarquer de plus, que (2.30a) conduit à l'équation (2.31), qui nous permet de voir que les sollicitations sont identiques pour toutes les phases ; cette valeur sera notée $\underline{\underline{\varepsilon}}^0$ et explicitée à partir de (2.30a).

$$\underline{\underline{\varepsilon}}_r^0 = \frac{1}{1 - c^r} \sum_{s \neq r} c^s \mathbb{P}^0 : (\mathbb{C}^* + \mathbb{C}^{(s)}) : (\mathbb{C}^* + \mathbb{C}^{(s)})^{-1} : (\mathbb{C}^* + \mathbb{C}^0) : \underline{\underline{\varepsilon}}_s^0 = \frac{1}{1 - c^r} \sum_{s \neq r} c^s \underline{\underline{\varepsilon}}_s^0 = \underline{\underline{\varepsilon}}^0 \quad (2.31a)$$

$$\underline{\underline{\varepsilon}}^0 = (\mathbb{C}^* + \mathbb{C}^0)^{-1} : \left[\sum_s c^s (\mathbb{C}^* + \mathbb{C}^{(s)})^{-1} \right]^{-1} : \underline{\underline{E}} \quad (2.31b)$$

On notera qu'on peut toujours, du fait de la linéarité du milieu, écrire formellement la localisation des champs mécaniques sous la forme (2.32).

$$\underline{\underline{\varepsilon}}(\underline{x}) = \mathbb{A}(\underline{x}) : \underline{\underline{E}} \quad (2.32a)$$

$$\underline{\underline{\sigma}}(\underline{x}) = \mathbb{B}(\underline{x}) : \underline{\underline{\Sigma}} \quad (2.32b)$$

Ces relations imposent en particulier aux tenseurs \mathbb{A} et \mathbb{B} d'être égaux en moyenne à l'identité.

Deux alternatives sont présentées ici pour aborder le problème de la localisation. On peut tenter d'estimer les tenseurs de localisation \mathbb{A} et \mathbb{B} via une formulation "ad hoc" ou utiliser une formulation variationnelle, dite de Hashin et Shtrikman, qui renvoie à la notion de problème d'inclusion formel.

¹⁶Nous nous limiterons à ce cas dans tout le travail, les approches de type Walpole [208] étant volontairement écartées de notre étude. Ce type de traitement a été étudié par Vernusse [205] dans un cadre biphasé non cristallin.

¹⁷ $\underline{\underline{\tau}}^{(r)} = (\mathbb{C}^{(r)} - \mathbb{C}^0) : \underline{\underline{\varepsilon}}^{(r)}$.

2.1.3 Formulations “ad hoc”

Les formulations “ad hoc” consistent à estimer les tenseurs de localisation au vu des caractéristiques géométriques de la microstructure. Connaissant ces expressions, il est alors possible de passer de l'échelle macroscopique à l'échelle microscopique et la suite de la démarche consiste à utiliser les relations de comportement locales (2.33)

$$\underline{\underline{\sigma}}(\underline{x}) = \mathbb{C}(\underline{x}) : \underline{\underline{\varepsilon}}(\underline{x}) \quad (2.33a)$$

$$\underline{\underline{\varepsilon}}(\underline{x}) = \mathbb{S}(\underline{x}) : \underline{\underline{\sigma}}(\underline{x}) \quad (2.33b)$$

puis à prendre la moyenne des champs ainsi obtenus afin d'aboutir au comportement effectif du matériau (2.34) liant contrainte et déformation macroscopique.

$$\underline{\underline{\Sigma}} = \langle \mathbb{C}(\underline{x}) : \mathbb{A}(\underline{x}) \rangle : \underline{\underline{E}} = \tilde{\mathbb{C}} : \underline{\underline{E}} \quad (2.34a)$$

$$\underline{\underline{E}} = \langle \mathbb{S}(\underline{x}) : \mathbb{B}(\underline{x}) \rangle : \underline{\underline{\Sigma}} = \tilde{\mathbb{S}} : \underline{\underline{\Sigma}} \quad (2.34b)$$

Une autre définition des tenseurs effectifs peut être obtenue en considérant les égalités énergétiques (2.35).

$$\frac{1}{2} \langle \underline{\underline{\varepsilon}}(\underline{x}) : \mathbb{C}(\underline{x}) : \underline{\underline{\varepsilon}}(\underline{x}) \rangle = \frac{1}{2} \underline{\underline{E}} : \tilde{\mathbb{C}} : \underline{\underline{E}} \quad \text{soit} \quad \tilde{\mathbb{C}} = \langle \mathbb{A}(\underline{x}) : \mathbb{C}(\underline{x}) : \mathbb{A}(\underline{x}) \rangle \quad (2.35a)$$

$$\frac{1}{2} \langle \underline{\underline{\sigma}}(\underline{x}) : \mathbb{S}(\underline{x}) : \underline{\underline{\sigma}}(\underline{x}) \rangle = \frac{1}{2} \underline{\underline{\Sigma}} : \tilde{\mathbb{S}} : \underline{\underline{\Sigma}} \quad \text{soit} \quad \tilde{\mathbb{S}} = \langle \mathbb{B}(\underline{x}) : \mathbb{S}(\underline{x}) : \mathbb{B}(\underline{x}) \rangle \quad (2.35b)$$

On montre [215], en considérant les tenseurs de localisation comme des champs admissibles (composantes par composantes) et en utilisant le lemme de Hill que ces définitions sont équivalentes aux précédentes. Il est à noter que, si l'on fixe une forme pour le champ de tenseurs \mathbb{A} , par exemple, l'expression des tenseurs \mathbb{B} est déterminée si l'on veut éviter tout saut de dualité. Les équations (2.36) obtenues à partir des expressions (2.32) et (2.34) décrivent ces relations entre les tenseurs de localisation.

$$\mathbb{B}(\underline{x}) = \mathbb{C}(\underline{x}) : \mathbb{A}(\underline{x}) : \langle \mathbb{C} : \mathbb{A} \rangle^{-1} = \mathbb{C}(\underline{x}) : \mathbb{A}(\underline{x}) : \tilde{\mathbb{C}}^{-1} \quad (2.36a)$$

$$\mathbb{A}(\underline{x}) = \mathbb{S}(\underline{x}) : \mathbb{B}(\underline{x}) : \langle \mathbb{S} : \mathbb{B} \rangle^{-1} = \mathbb{S}(\underline{x}) : \mathbb{B}(\underline{x}) : \tilde{\mathbb{S}}^{-1} \quad (2.36b)$$

La première idée que l'on peut avoir pour décrire la localisation consiste à imaginer qu'un champ de contrainte ou de déformation macroscopique imposé conduit à un champ de contrainte ou de déformation homogène dans le matériau. On obtient ainsi en déformations homogènes l'estimation de Voigt (2.37).

$$\mathbb{A}^V(\underline{x}) = \mathbb{I} \quad \tilde{\mathbb{C}}^V = \langle \mathbb{C}(\underline{x}) \rangle \quad (2.37)$$

Cette formulation préconise l'emploi de la moyenne arithmétique des tenseurs de rigidité pour estimer le comportement effectif. En contrainte homogène, on trouve l'estimation de Reuss (2.38) qui, quant à elle, décrit la raideur effective comme la moyenne harmonique des raideurs des constituants.

$$\mathbb{B}^R(\underline{x}) = \mathbb{I} \quad \tilde{\mathbb{S}}^R = \langle \mathbb{S}(\underline{x}) \rangle \quad (2.38)$$

Nous pouvons remarquer que ces descriptions, très simples, n'assurent l'admissibilité que d'un seul des champs mécaniques. L'application d'un tel modèle nécessite une justification basée sur la distribution des phases et sur le type de sollicitation. Les modèles de Voigt et Reuss sont, en quelque sorte, des prototypes pour cette approche, on peut citer d'autres modèles d'estimation définis dans ce cadre [215] tels par exemple, le modèle en haute dilution, le modèle auto-cohérent ou le modèle de Mori-Tanaka.

2.1.4 Approches variationnelles

Comme on l'a vu, les formulations “ad hoc” ont un domaine de validité limité, c'est à l'utilisateur de juger si la situation permet raisonnablement de décrire ainsi la localisation. Il serait intéressant d'avoir une idée de l'erreur faite entre la solution réelle et l'estimation. De plus, il n'est pas totalement satisfaisant de se dire qu'une information statistique limitée sur la microstructure conduit à une estimation macroscopique déterministe. Il est clair que les informations statistiques non prises en compte dans la modélisation

doivent laisser un domaine d'incertitude lors de la description du comportement homogénéisé. Cette indétermination peut être représentée par un “fuseau” dans lequel doit se situer notre estimation. Ce sont toutes ces remarques qui donnent leur attrait aux méthodes variationnelles qui nous permettent d'encadrer, par des principes énergétiques, le domaine représentant les solutions (en nombre infini en général) pour une information statistique donnée.

2.1.4.a Formulation classique

La forme globale ou faible du problème d'élasticité macro-homogène est donnée par la formulation variationnelle (2.39a) en déformation macroscopique imposée et par (2.39b) en contrainte macroscopique imposée. A partir de ces relations, il est possible d'exprimer les densités d'énergie effectives, qui seront notées d'un tilde.

$$\tilde{w}(\underline{E}) = \min_{\underline{\varepsilon}^* \in \mathcal{C}^m(\underline{E})} \langle w(\underline{u}^*(\underline{x})) \rangle = - \min_{\underline{\sigma}^* \in \mathcal{S}^m} \langle u(\underline{\sigma}^*(\underline{x})) - \underline{\sigma}^* : \underline{E} \rangle \quad (2.39a)$$

$$\tilde{u}(\underline{\Sigma}) = \min_{\underline{\sigma}^* \in \mathcal{S}^m(\underline{\Sigma})} \langle u(\underline{\sigma}^*(\underline{x})) \rangle = - \min_{\underline{\varepsilon}^* \in \mathcal{C}^m} \langle w(\underline{u}^*(\underline{x})) - \underline{\varepsilon}^* : \underline{\Sigma} \rangle \quad (2.39b)$$

La méthode élémentaire de construction de bornes consiste à imaginer des champs d'essais qui puissent être utilisés dans une formulation variationnelle du problème de (micro)structure (2.39). Si l'on considère, par exemple, un champ de déformation homogène $\underline{\varepsilon}^*$ apparaissant dans le matériau du fait de l'application de la déformation moyenne \underline{E} , le champ est cinématiquement admissible au sens macro-homogène dès lors que $\underline{\varepsilon}^* = \underline{E}$, et conduit à l'inégalité (2.40).

$$\tilde{w}(\underline{E}) \leq \frac{1}{2} \underline{E} : \tilde{\mathbb{C}}^V : \underline{E} \quad \text{avec} \quad \tilde{\mathbb{C}}^V = \langle \mathbb{C}(\underline{x}) \rangle \quad (2.40)$$

Cette expression du tenseur effectif a déjà été proposée en (2.37) pour des microstructures laissant supposer que le champ de déformation apparaissant dans le matériau devrait être homogène. Si la forme de cette équation est la même, son interprétation est bien différente, car ici nous obtenons un résultat valable quelle que soit la microstructure. Ce résultat s'énonce en disant que le comportement effectif est toujours inférieur au comportement prévu par la borne de Voigt au sens des formes quadratiques. L'estimation de Voigt acquiert donc ici le statut de borne, ainsi toute estimation ne respectant pas ce résultat sera sans intérêt car manifestement inadéquate pour décrire le comportement effectif. On peut, de même, obtenir la borne inférieure de Reuss en considérant un champ de contrainte homogène dans le principe de minimum de l'énergie complémentaire. La connaissance de deux bornes permet d'encadrer le comportement du milieu hétérogène que l'on souhaite modéliser. Si ces deux bornes sont atteignables, c'est-à-dire s'il existe des microstructures définies à partir de l'information microstructurale qui peuvent effectivement présenter le comportement des bornes, alors l'amplitude entre ces bornes caractérise exactement l'indétermination du comportement liée à l'aspect partiel de l'information statistique sur le matériau.

Ce type de construction se heurte à la difficulté de fournir des champs admissibles, plus complexes que des champs homogènes et qui soient pertinents avec la description de la microstructure. Pour construire ce type de champ, on peut imaginer se baser sur les solutions de problèmes d'inclusions ou de problèmes d'inclusions fictifs évoqués précédemment. Une reformulation du principe variationnel basé sur ces familles de champs admissibles par construction sera donc naturellement dispensée des contraintes différentielles d'admissibilité. Une reformulation de cette sorte a été fournie par Hashin et Shtrikman [70] et généralisée à de multiples situations. Nous allons maintenant en présenter les principes.

2.1.4.b Formulation de Hashin et Shtrikman

L'idée de départ est de faire apparaître, de force, la solution d'un problème d'inclusion formel dans la formulation énergétique générale. Pour ce faire introduisons un milieu homogène \mathbb{C}^0 subissant un champ de polarisation $\underline{\tau}$ et soumis à la déformation macroscopique \underline{E} . Les champs mécaniques solutions apparaissant dans le matériau peuvent s'écrire $\underline{\varepsilon}^*(\underline{x})$ et $\underline{\sigma}^*(\underline{x}) = \mathbb{C}^0 : \underline{\varepsilon}^*(\underline{x}) + \underline{\tau}(\underline{x})$. Comme on l'a vu, il existe des solutions formelles donnant ces champs de déformation et de contrainte à partir de la connaissance des champs de polarisation, nous considérerons donc $\underline{\varepsilon}^*(\underline{x}, \underline{\tau}(\underline{x}), \underline{E})$ et $\underline{\sigma}^*(\underline{x}, \underline{\tau}(\underline{x}), \underline{E})$. Partons de l'expression de l'énergie pour le problème de polarisation, le lemme de Hill permet d'écrire

successivement :

$$\langle \underline{\underline{\sigma}}^*(\underline{x}) : \underline{\underline{\varepsilon}}^*(\underline{x}) \rangle = \langle \underline{\underline{\sigma}}^*(\underline{x}) \rangle : \langle \underline{\underline{\varepsilon}}^*(\underline{x}) \rangle \quad (2.41a)$$

$$\langle (\mathbb{C}^0 : \underline{\underline{\varepsilon}}^*(\underline{x}) + \underline{\underline{\tau}}(\underline{x})) : \underline{\underline{\varepsilon}}^*(\underline{x}) \rangle = \langle \mathbb{C}^0 : \underline{\underline{\varepsilon}}^*(\underline{x}) + \underline{\underline{\tau}}(\underline{x}) \rangle : \langle \underline{\underline{\varepsilon}}^*(\underline{x}) \rangle \quad (2.41b)$$

$$\langle \underline{\underline{\varepsilon}}^*(\underline{x}) : \mathbb{C}^0 : \underline{\underline{\varepsilon}}^*(\underline{x}) \rangle = \underline{\underline{E}} : \mathbb{C}^0 : \underline{\underline{E}} + \langle \underline{\underline{\tau}}(\underline{x}) : (\underline{\underline{E}} - \underline{\underline{\varepsilon}}^*(\underline{x})) \rangle \quad (2.41c)$$

Il s'agit, maintenant, de faire apparaître le milieu composite $\mathbb{C}(\underline{x})$ que l'on souhaite modéliser, puis de chercher à se rapprocher d'une expression permettant d'expliciter les champs mécaniques moyens pour des polarisations homogènes par morceaux en utilisant (2.27d).

$$\langle \underline{\underline{\varepsilon}}^* : \mathbb{C} : \underline{\underline{\varepsilon}}^* \rangle = \underline{\underline{E}} : \mathbb{C}^0 : \underline{\underline{E}} + \langle \underline{\underline{\tau}} : (\underline{\underline{E}} - \underline{\underline{\varepsilon}}^*) \rangle + \langle \underline{\underline{\varepsilon}}^* : (\mathbb{C} - \mathbb{C}^0) : \underline{\underline{\varepsilon}}^* \rangle \quad (2.42a)$$

$$\begin{aligned} \langle \underline{\underline{\varepsilon}}^* : \mathbb{C} : \underline{\underline{\varepsilon}}^* \rangle &= \underline{\underline{E}} : \mathbb{C}^0 : \underline{\underline{E}} + \left[\langle \underline{\underline{\tau}} : (\underline{\underline{E}} - \underline{\underline{\varepsilon}}^*) \rangle + 2 \langle \underline{\underline{\tau}} : \underline{\underline{\varepsilon}}^* \rangle - \langle \underline{\underline{\tau}} : (\mathbb{C} - \mathbb{C}^0)^{-1} : \underline{\underline{\tau}} \rangle \right] \\ &\quad + \left[\langle \underline{\underline{\varepsilon}}^* : (\mathbb{C} - \mathbb{C}^0) : \underline{\underline{\varepsilon}}^* \rangle - 2 \langle \underline{\underline{\tau}} : \underline{\underline{\varepsilon}}^* \rangle + \langle \underline{\underline{\tau}} : (\mathbb{C} - \mathbb{C}^0)^{-1} : \underline{\underline{\tau}} \rangle \right] \end{aligned} \quad (2.42b)$$

$$\begin{aligned} \langle \underline{\underline{\varepsilon}}^* : \mathbb{C} : \underline{\underline{\varepsilon}}^* \rangle &= \underline{\underline{E}} : \mathbb{C}^0 : \underline{\underline{E}} + \langle \underline{\underline{\tau}} : (\underline{\underline{E}} + \underline{\underline{\varepsilon}}^* - [\mathbb{C} - \mathbb{C}^0]^{-1} : \underline{\underline{\tau}}) \rangle \\ &\quad + \langle (\underline{\underline{\varepsilon}}^* - [\mathbb{C} - \mathbb{C}^0]^{-1} : \underline{\underline{\tau}}) : (\mathbb{C} - \mathbb{C}^0) : (\underline{\underline{\varepsilon}}^* - [\mathbb{C} - \mathbb{C}^0]^{-1} : \underline{\underline{\tau}}) \rangle \end{aligned} \quad (2.42c)$$

Le second membre de cette équation¹⁸ est composé de trois termes, le premier décrivant l'énergie du milieu de référence soumis à la sollicitation macroscopique, le second terme est une fonctionnelle de polarisation et le dernier terme est une forme quadratique. Les deux premiers termes constituent le double de la fonctionnelle de Hashin et Shtrikman notée $\text{HS}(\underline{\underline{\tau}})$ et le dernier terme est le double d'une fonctionnelle notée $\Delta w(\underline{\underline{\tau}})$. Le même type de relation peut être obtenu à partir de l'énergie complémentaire :

$$\frac{1}{2} \langle \underline{\underline{\sigma}}^* : \mathbb{S} : \underline{\underline{\sigma}}^* \rangle - \langle \underline{\underline{\sigma}}^* \rangle : \underline{\underline{E}} = -\text{HS}(\underline{\underline{\tau}}) + \Delta u(\underline{\underline{\tau}}) \quad (2.43)$$

avec

$$\Delta u(\underline{\underline{\tau}}) = \left\langle (\underline{\underline{\varepsilon}}^* - [\mathbb{C} - \mathbb{C}^0]^{-1} : \underline{\underline{\tau}}) : \mathbb{C}^0 : (\mathbb{S} - \mathbb{S}^0) : \mathbb{C}^0 : (\underline{\underline{\varepsilon}}^* - [\mathbb{C} - \mathbb{C}^0]^{-1} : \underline{\underline{\tau}}) \right\rangle \quad (2.44)$$

Les inégalités déduites de (2.39a) conduisent à l'encadrement (2.45) pour un champ d'essai $\underline{\underline{\tau}}$.

$$\text{HS}(\underline{\underline{\tau}}) - \Delta u(\underline{\underline{\tau}}) \leq \frac{1}{2} \underline{\underline{E}} : \tilde{\mathbb{C}} : \underline{\underline{E}} \leq \text{HS}(\underline{\underline{\tau}}) + \Delta w(\underline{\underline{\tau}}) \quad (2.45)$$

Une écriture en contrainte pourrait être obtenue de la même façon.

Cette nouvelle formulation variationnelle a plusieurs propriétés que nous allons décrire maintenant. La première remarque que nous pouvons faire, est que la fonctionnelle de Hashin et Shtrikman coïnciderait avec l'énergie effective pour une polarisation de la forme $\underline{\underline{\tau}}(\underline{x}) = (\mathbb{C}(\underline{x}) - \mathbb{C}^0) : \underline{\underline{\varepsilon}}(\underline{x})$. Mais nous ne savons, a priori, donner une forme explicite à la déformation que dans le cas de champs de polarisation homogènes par morceaux. Dans ce cas, la fonctionnelle de Hashin et Shtrikman prend la forme suivante :

$$\text{HS}(\underline{\underline{\tau}}) = \frac{1}{2} \underline{\underline{E}} : \mathbb{C}^0 : \underline{\underline{E}} + \sum_r c^r \underline{\underline{\tau}}^{(r)} : \left(\underline{\underline{E}} + \underline{\underline{\varepsilon}}^{(r)} - [\mathbb{C}^{(r)} - \mathbb{C}^0]^{-1} : \underline{\underline{\tau}}^{(r)} \right) \quad (2.46)$$

Il est à noter également que la forme quadratique des tenseurs $\Delta w(\underline{\underline{\tau}})$ et $\Delta u(\underline{\underline{\tau}})$ permet de faire de la fonctionnelle de Hashin et Shtrikman une borne pour l'énergie effective du matériau. En effet, si $(\mathbb{C}^0 - \mathbb{C}^{(r)})$ est défini-positif pour tout r alors HS est une borne supérieure car $\Delta w \leq 0$, si au contraire $(\mathbb{C}^{(r)} - \mathbb{C}^0)$ est défini-positif pour tout r , alors $(\mathbb{S}^{(r)} - \mathbb{S}^0)$ est défini-positif pour tout r et HS est une borne inférieure car $\Delta u \leq 0$.

Une fois l'un de ces choix effectué, il est possible d'optimiser la borne en ajustant le champ de polarisation. Mais il est à noter qu'aucune contrainte différentielle ne s'applique sur le champ de polarisation $\underline{\underline{\tau}}$, l'admissibilité des champs mécaniques étant assurée par l'utilisation de la solution d'un problème d'inclusion

¹⁸L'utilisation de la polarisation $\underline{\underline{\tau}}$ dans les expressions précédentes fait intervenir le terme $(\mathbb{C} - \mathbb{C}^0)^{-1}$ qui peut être singulier. Afin d'éviter cette difficulté il est possible de réécrire ces formulations, en suivant [22, 21], pour une polarisation de la forme $\underline{\underline{\tau}} = (\mathbb{C} - \mathbb{C}^0) : \underline{\underline{\eta}}$.

fictif. On peut montrer par différentiation [22] que les conditions d'optimalité du champ de polarisation, dans le cadre de polarisations homogènes par phases, sont de la forme (2.47)

$$\forall r, \underline{\mathbb{C}}^{(r)} = \left(\mathbb{C}^{(r)} - \mathbb{C}^0 \right) : \underline{\mathbb{E}}^{(r)} \quad (2.47)$$

Le tenseur de localisation associé à un tel problème peut alors s'obtenir à partir des expressions (2.30a) et (2.31) pour des distributions ellipsoïdales :

$$\mathbb{A}^{(r)}(\mathbb{C}^0) = \left(\mathbb{C}^* + \mathbb{C}^{(r)} \right)^{-1} : \left[\sum_s c^s \left(\mathbb{C}^* + \mathbb{C}^{(s)} \right)^{-1} \right]^{-1} \quad (2.48)$$

cette expression permet d'exprimer le comportement effectif à l'aide de la relation (2.34)

$$\mathbb{C}^{\text{HS}}(\mathbb{C}^0) = \left[\sum_r c^r \mathbb{C}^{(r)} : \left(\mathbb{C}^* + \mathbb{C}^{(r)} \right)^{-1} \right] : \left[\sum_s c^s \left(\mathbb{C}^* + \mathbb{C}^{(s)} \right)^{-1} \right]^{-1} \quad (2.49)$$

Une expression équivalente peut être obtenue en considérant (2.30a) et en utilisant l'expression (2.31b) de $\underline{\mathbb{E}}^0$ dans le cas particulier qui nous intéresse.

$$\mathbb{C}^{\text{HS}} : \underline{\mathbb{E}} = \sum_r c^r \mathbb{C}^{(r)} : \underline{\mathbb{E}}^{(r)} = \sum_r c^r \left[\left(\mathbb{C}^* + \mathbb{C}^0 \right) : \underline{\mathbb{E}}^0 - \mathbb{C}^* : \underline{\mathbb{E}}^{(r)} \right] \quad (2.50a)$$

$$= \left(\mathbb{C}^* + \mathbb{C}^0 \right) : \underline{\mathbb{E}}^0 - \mathbb{C}^* : \underline{\mathbb{E}} \quad (2.50b)$$

$$\mathbb{C}^{\text{HS}} = \left[\sum_r c^r \left(\mathbb{C}^* + \mathbb{C}^{(r)} \right)^{-1} \right]^{-1} - \mathbb{C}^* \quad (2.50c)$$

Modèles particuliers associés au choix de \mathbb{C}^0

Le choix de \mathbb{C}^0 va influencer sur le résultat final. En effet, il est à noter que ce comportement a été introduit de façon à ce qu'il joue le rôle de "matrice" dans le problème d'inclusion fictif, c'est donc lui, principalement, qui durcira ou ramollira le matériau suivant qu'il sera plus ou moins raide.

Nous avons vu que si ce tenseur était plus raide¹⁹ que le module de chaque phase, i.e. pour tout tenseur $\underline{\underline{a}}$ d'ordre deux :

$$\underline{\underline{a}} : \left(\mathbb{C}^0 - \mathbb{C}^{(r)} \right) : \underline{\underline{a}} \geq 0 \quad (2.51)$$

alors, on avait une borne supérieure pour le potentiel effectif, soit $\mathbb{C}^{\text{HS}} \geq \tilde{\mathbb{C}}$. On peut montrer [22, 208] qu'en fait le tenseur de Hashin et Shtrikman est croissant en fonction du tenseur du milieu de référence.

$$\forall \mathbb{C}_1^0 \geq \mathbb{C}_2^0, \mathbb{C}^{\text{HS}}(\mathbb{C}_1^0) \geq \mathbb{C}^{\text{HS}}(\mathbb{C}_2^0) \quad (2.52)$$

On en déduit que la borne supérieure optimale que l'on peut obtenir à l'aide de la formulation de Hashin et Shtrikman est donnée par le plus petit \mathbb{C}^0 supérieur aux modules de tous les constituants. Si le comportement des constituants est ordonné, c'est-à-dire si :

$$\mathbb{C}^{(1)} \leq \mathbb{C}^{(2)} \leq \dots \leq \mathbb{C}^{(n)} \quad (2.53)$$

alors la borne supérieure est obtenue pour $\mathbb{C}^0 = \mathbb{C}^{(n)}$. Il en va de même pour la borne inférieure. Si les comportements ne sont pas ordonnés la détermination des bornes optimales est plus délicate.

On peut noter également que lorsque $\mathbb{C}^0 \rightarrow 0$ on retrouve la borne de Reuss alors que, lorsque $\mathbb{C}^0 \rightarrow +\infty$ on obtient la borne de Voigt. Les modèles dérivés de la formulation de Hashin et Shtrikman respectent donc ces bornes élémentaires.

Au delà de ces bornes, diverses estimations peuvent être envisagées. Dans le cadre de ce travail nous en utiliserons deux classiques.

L'estimation de Willis/Hashin-Shtrikman (W/HS) qui consiste à utiliser comme comportement de référence le comportement de l'une des phases. En effet, dans le cas d'un composite particulière en très faible fraction volumique, l'hypothèse d'homogénéité de la polarisation par phase est vérifiée d'après la

¹⁹ Les relations d'ordre sur les tenseurs seront toujours à prendre au sens des formes quadratiques (2.51).

solution inhomogène d'Eshelby. Cette observation incite à considérer que la formulation variationnelle de Hashin et Shtrikman, utilisée pour un comportement de référence égal au comportement de la matrice du composite particulière, étend l'estimation d'Eshelby au cas où les phases ne sont plus en fraction faible. Le champ de polarisation restant homogène dans les phases (et nulle dans la matrice du fait du choix de \mathbb{C}^0), il intègre maintenant une contribution moyenne supplémentaire due aux interactions, en ce sens ce modèle est proche de la description “ad-hoc” proposée par Mori et Tanaka [131]. Il est clair, conformément à ce que nous avons vu précédemment, que si la matrice présente un comportement extrême (au sens des formes quadratiques) par rapport au comportement des autres constituants, nous retrouverons l'une des bornes de Hashin et Shtrikman.

La seconde estimation qui sera utilisée est l'estimation auto-cohérente (notée SC). Cette description a d'abord été proposée en tant que formulation “ad-hoc” [76, 77] mais la formulation variationnelle de Hashin et Shtrikman permet de lui donner un fondement énergétique. Lorsqu'aucune phase ne peut être assimilée à une matrice dans le matériau, on peut penser à utiliser comme milieu de référence le comportement effectif lui-même. Ceci définit une procédure implicite de détermination du tenseur des modules de la forme (2.54).

$$\mathbb{C}^{\text{SC}} = \mathbb{C}^{\text{HS}}(\mathbb{C}^{\text{SC}}) \quad (2.54)$$

Cette procédure trouve également sa justification en terme d'information microstructurale. En effet Kröner [98] montre que, dans un cadre “parfaitement désordonné” (qui est donc un cas où l'information microstructurale est parfaitement définie) le comportement effectif est régi par le comportement auto-cohérent. Ce modèle sera ainsi bien adapté aux matériaux pour lesquels les différentes phases jouent des rôles similaires et ne présentent pas d'ordonnancement particulier.

Les formulations variationnelles permettent, en fait, d'obtenir plus que le comportement effectif à l'échelle macroscopique et les moyennes par phase des champs mécaniques. En particulier, certains moments décrivant la dispersion dans ces champs peuvent être calculés. La méthode d'obtention de ces termes sera évoquée brièvement dans la partie suivante traitant des polycristaux non linéaires.

2.2 Cas des polycristaux viscoplastiques

Après le rappel de ces quelques notions d'homogénéisation pour les composites linéaires, nous allons considérer le cas de matériaux polycristallins viscoplastiques, cadre qui nous intéresse pour traiter notre problème de mise en forme à haute température. Nous avons vu dans le début de ce travail que les contraintes, les déformations et les vitesses de déformation mises en jeu lors de la sollicitation du matériau étaient principalement viscoplastiques, c'est-à-dire que l'élasticité pouvait être négligée. On considérera donc que, dès le début de la sollicitation, le matériau évolue dans ce domaine et qu'il n'y a pas de notion de limite d'élasticité à intégrer et donc pas de cission critique pour activer l'écoulement plastique. Cette notion est remplacée par une cission de référence qui représentera l'évolution de la rigidité des systèmes du fait des phénomènes physiques décrits en §1.3.2 et en §1.6.3. Nous écrirons donc respectivement $\underline{\sigma}(\underline{\dot{\epsilon}}, T)$ et $\tau(\dot{\gamma}, T)$ à l'échelle du VER et à l'échelle d'un système de glissement.

Avant de considérer les méthodes d'homogénéisation non linéaires utilisées pour le traitement d'un tel problème nous allons décrire la cinématique particulière associée à un monocristal viscoplastique.

2.2.1 Représentation et cinématique

Un polycristal peut être vu comme un assemblage de monocristaux parfaitement accolés où chacun de ces monocristaux est caractérisé par une orientation cristallographique. Ainsi, si un polycristal est composé de N familles d'orientations cristallographiques, on peut considérer que l'on a affaire à un composite à N phases. Le terme de famille d'orientations se réfère à l'ensemble des grains du polycristal présentant la même orientation cristallographique $\Phi = (\phi_1; \varphi; \phi_2)$ à une fluctuation angulaire $d\Phi = \sin(\varphi) d\phi_1 d\varphi d\phi_2$ près dans le formalisme des angles d'Euler. Cette notion correspond à la discrétisation de l'espace des orientations en éléments qui s'identifient à des familles d'orientations.

La vision du polycristal comme un matériau à N phases nous permet d'utiliser les notions de fonctions de corrélation à p -points d'appui présentées en §2.1.1.c qui sont plutôt nommées fonctions de corrélations des orientations à p -points d'appui (p -FCO) pour ce type d'application [3, 56, 80]. La difficulté d'obtention de ce type d'information fait que l'on se limite, en général, à la 1-FCO aussi appelée fonction de distribution des orientations au sens où cette quantité représente la probabilité de trouver une orientation donnée au sein du matériau (c'est donc bien une densité de probabilité).

L'échelle de départ que nous choisissons pour modéliser les polycristaux est l'échelle du monocristal et nous considérerons que les déformations à cette échelle se font uniquement par glissement le long de ses systèmes (le maillage n'est pas considéré dans ces modèles). Notre variable cinématique la plus fine sera la vitesse de glissement sur l'ensemble des systèmes présentant même normale et même direction de glissements. La variable d'effort la plus fine sera la cisssion résolue associée et le comportement élémentaire sera lié à la relation non linéaire entre ces quantités. Le matériau polycristallin va subir de grandes déformations au cours de la mise en forme, il sera donc nécessaire de mettre à jour ses caractéristiques microstructurales. La cinématique eulérienne est particulièrement adaptée dans ce cadre car elle permet de décomposer l'évolution en une succession d'incrémentes qui se déduisent les uns des autres à l'aide de petites perturbations. Pour s'en convaincre, explicitons le cadre cinématique dans lequel nous allons évoluer. Le matériau est défini à tout instant t à partir de sa configuration de référence (associée à la variable de position \underline{X}) à travers l'équation (2.55a). La différentiation de cette expression traduit la transformation homogène tangente associée pour des vecteurs infinitésimaux (2.55b).

$$\underline{x} = \underline{\phi}(\underline{X}, t) \quad (2.55a)$$

$$d\underline{x} = \frac{\partial \underline{\phi}}{\partial \underline{X}}(\underline{X}, t) \cdot d\underline{X} = \underline{F}(\underline{X}, t) \cdot d\underline{X} \quad (2.55b)$$

En notant maintenant \underline{M}_0 un vecteur infinitésimal dont le transporté est noté \underline{M}_t et en considérant la dérivée temporelle d'un tel élément, on obtient (2.56a) et (2.56b).

$$\dot{\underline{M}}_t = \dot{\underline{F}}(\underline{X}, t) \cdot \underline{M}_0 \quad (2.56a)$$

$$\dot{\underline{M}}_t = \dot{\underline{F}}(\underline{X}, t) \cdot (\underline{F}(\underline{X}, t))^{-1} \cdot \underline{M}_t = \underline{L}(\underline{X}, t) \cdot \underline{M}_t \quad (2.56b)$$

en notant que \underline{L} est le gradient eulérien des vitesses :

$$\dot{\underline{F}} \cdot \underline{F}^{-1} = \frac{\partial}{\partial t} \left[\frac{\partial \underline{x}}{\partial \underline{X}} \right] \cdot \frac{\partial \underline{X}}{\partial \underline{x}} = \frac{\partial \underline{v}}{\partial \underline{x}} \quad (2.57)$$

Le tenseur des déformations de Green-Lagrange exprimant l'évolution du produit scalaire de deux vecteurs élémentaires \underline{M} et \underline{M}' liés au même point de l'espace s'exprime entre t et $t + dt$ sous la forme (2.58).

$$\underline{M}_{t+dt} \cdot \underline{M}'_{t+dt} - \underline{M}_t \cdot \underline{M}'_t = \frac{d\underline{M}_t \cdot \underline{M}'_t}{dt} dt = \left[\underline{M}_t \cdot \dot{\underline{M}}'_t + \dot{\underline{M}}_t \cdot \underline{M}'_t \right] dt = \underline{M}_t \cdot [\underline{L} + \underline{L}^T] \cdot \underline{M}'_t dt \quad (2.58)$$

Le tenseur de Green-Lagrange dans ces conditions prend la forme $\frac{1}{2} [\underline{L} + \underline{L}^T] dt$ qui est une forme linéarisée. Cette linéarisation provient du fait que l'on considère des intervalles de temps infinitésimaux qui conduisent donc à des déplacements faibles. Nous travaillerons donc dans la suite sur le tenseur des taux de déformation eulérien noté $\underline{\dot{\epsilon}}$ qui s'exprime suivant (2.59) et qui se comportera tout comme une déformation linéarisée en faisant un parallèle entre $\underline{\nabla} \otimes \underline{u}$ et \underline{L} . Le parallèle pourra être prolongé par la seconde égalité de (2.59) si l'on considère, comme nous le ferons dans toute la suite, que l'évolution viscoplastique peut être liée à un potentiel des dissipations $u(\underline{\sigma})$.

$$\underline{\dot{\epsilon}} = \frac{1}{2} [\underline{L} + \underline{L}^T] = \frac{\partial u}{\partial \underline{\sigma}} \quad (2.59)$$

Précisons également que $\underline{\sigma}$ est le tenseur de Cauchy défini sur la configuration actuelle. Nous pourrions donc utiliser les résultats introduits précédemment dans le cadre de l'élasticité sous l'hypothèse des petites perturbations, en substituant $\underline{\dot{\epsilon}}$ à $\underline{\epsilon}$, dans le schéma eulérien viscoplastique qui vient d'être introduit.

Ce cadre étant rappelé, il nous faut maintenant lier la vitesse de glissement le long des plans cristallins au taux de déformation associé à l'échelle du monocristal. Un monocristal présentant un seul système de glissement est représenté comme une superposition de parallélépipèdes rectangles séparés par des surfaces de normale sortante \underline{n} . La figure 2.5 représente deux de ces éléments, le §2.1.2.a nous a appris que pour passer du micro au macro, il fallait moyenner le champ de déformation et cela reste vrai dans le cas de la vitesse. On cherche donc à mesurer $\langle \underline{L} \rangle_g$ sur le monocristal g . Pour ce faire nous allons considérer une formule de Gauss pour se ramener à un calcul sur la surface extérieure de l'assemblage de parallélépipèdes. Le parallélépipède supérieur est animé d'une vitesse \underline{v} dans la direction \underline{m} . Les relations

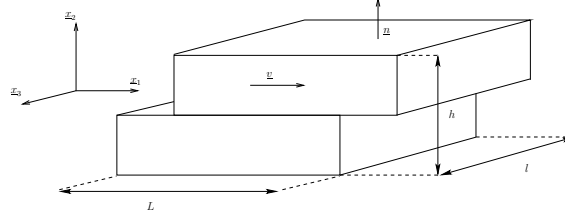


FIG. 2.5: Modélisation de la déformation d'un monocristal.

(2.60) s'appliquent et on voit que la seule composante non nulle est portée par $\underline{m} \otimes \underline{n}$ et vaut la norme du glissement multipliée par la surface commune aux deux parallélépipèdes (qui n'évolue presque pas pour les petits incréments de temps) et divisée par le volume des deux parallélépipèdes.

$$\langle \underline{L} \rangle_g = \frac{1}{|\Omega_g|} \int_{\partial\Omega_g} \underline{v} \otimes \underline{n} dS_{\underline{x}} = v \cdot \frac{(L - v \cdot dt) \cdot l}{|\Omega_g|} \underline{m} \otimes \underline{n} \approx \frac{v}{h} \underline{m} \otimes \underline{n} = \dot{\gamma} \underline{m} \otimes \underline{n} \quad (2.60)$$

$\dot{\gamma}$ peut donc s'interpréter comme l'évolution temporelle du demi-glissement (au sens des termes non diagonaux du tenseur des déformations). On déduit donc de cette analyse l'expression du taux de déformation (2.61a) et du taux de rotation (partie anti-symétrique de \underline{L}) (2.61b) pour un monocristal constitué de k systèmes de glissement.

$$\langle \underline{\dot{\varepsilon}} \rangle_g = \left\langle \frac{1}{2} (\underline{L} + \underline{L}^T) \right\rangle_g = \frac{1}{2} \sum_k \dot{\gamma}_{(k)} (\underline{m}_{(k)} \otimes \underline{n}_{(k)} + \underline{n}_{(k)} \otimes \underline{m}_{(k)}) = \sum_k \dot{\gamma}_{(k)} \underline{\mu}_{(k)} \quad (2.61a)$$

$$\langle \underline{\omega} \rangle_g = \left\langle \frac{1}{2} (\underline{L} - \underline{L}^T) \right\rangle_g = \frac{1}{2} \sum_k \dot{\gamma}_{(k)} (\underline{m}_{(k)} \otimes \underline{n}_{(k)} - \underline{n}_{(k)} \otimes \underline{m}_{(k)}) = \sum_k \dot{\gamma}_{(k)} \underline{w}_{(k)} \quad (2.61b)$$

Remarque : Déformation liée à une discontinuité de déplacement

Le théorème de Gauss utilisé dans cette section n'a pas vocation à s'appliquer aux milieux comprenant des discontinuités, bien qu'il puisse en fait être étendu à ce cas si on se place dans le formalisme des distributions comme on l'a fait ici. Mais ce calcul masque un phénomène important qui serait apparu clairement si l'on avait appliqué le théorème de Gauss uniquement sur les parallélépipèdes, c'est-à-dire en dehors de toute discontinuité. On aurait trouvé, bien sûr, que la déformation sur ces éléments est nulle car la déformation est totalement localisée au niveau de la discontinuité. On voit ici que dans le cas d'un matériau discontinu, la moyenne de la déformation des zones sans discontinuités ne s'identifie pas à la déformation macroscopique et une redéfinition de cette dernière est nécessaire.

On notera au passage que le taux de déformation plastique (2.61a) est isochore. On s'en aperçoit facilement en considérant que la trace des tenseurs $\underline{\mu}$ est toujours nulle du fait de l'orthogonalité de \underline{m} et \underline{n} . La nullité de ces traces impose celle du taux de déformation qui correspond à la valeur du taux de dilatation volumique, les variations instantanées de volumes sont donc nulles.

La cinématique des monocristaux étant connue, on peut compléter la figure 1.20 en incluant le passage par l'échelle des systèmes de glissement (figure 2.6).

Classiquement en mécanique des solides déformables on peut considérer, comme on l'a vu précédemment, un problème suivant deux formes duales : une approche en contrainte et une approche en déformation (ou en taux de déformation dans le cas présent). Ces deux formulations conduisent à deux types de résolution qui donnent des résultats équivalents lorsque la dualité est respectée. Si ce n'est pas le cas les solutions diffèrent et on parle de saut de dualité.

Dans le cas particulier des polycristaux viscoplastiques, traités ici, la loi d'écoulement locale est donnée non pas directement par des relations sur les tenseurs de contraintes et de taux de déformation locaux mais par le lien entre la cission résolue (2.62) et le taux de glissement sur ses systèmes défini en (2.61a).

$$\tau_{(k)} = \underline{\mu}_{(k)} : \underline{\sigma} \quad (2.62)$$

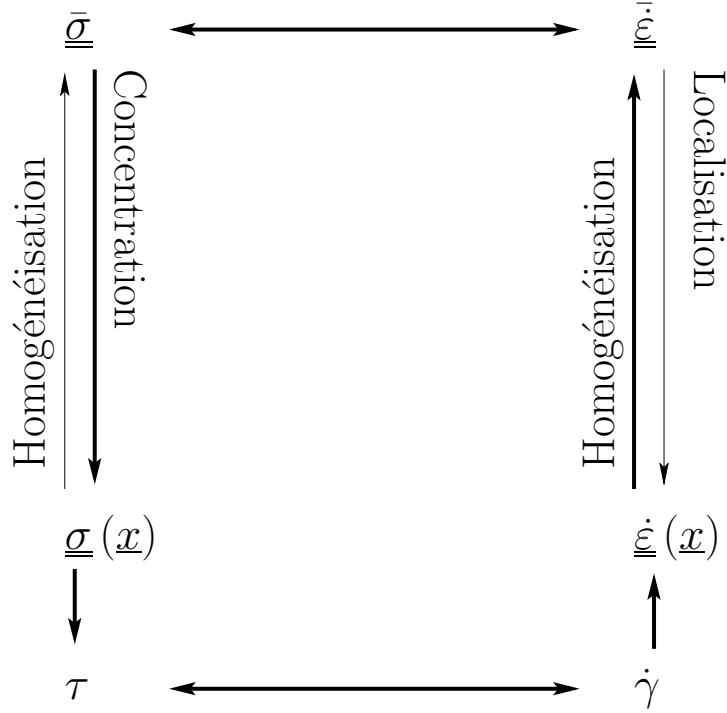


FIG. 2.6: Représentation schématique de la méthode micromécanique dans le cas polycristallin.

Or, les applications $\underline{\underline{\dot{\epsilon}}} \mapsto \dot{\gamma}$ et $\underline{\underline{\sigma}} \mapsto \tau$ ne sont pas bijectives. Il peut exister, a priori, plusieurs façons de choisir les taux de glissement pour obtenir le tenseur $\underline{\underline{\dot{\epsilon}}}$ et il n'est pas toujours possible de trouver un tenseur $\underline{\underline{\sigma}}$ pour des cisssions résolues données. Afin d'éviter toute ambiguïté on considère donc les applications injectives décrites en rouge sur la figure 2.6 et qui correspondent à la formulation en contrainte. Ainsi, que l'on soit en contrainte ou en déformation imposée, on se ramènera toujours à cette formulation pour permettre la transition entre la description sous forme de systèmes de glissement et la description tensorielle du milieu continu à l'échelle locale. Dans ce cadre, on peut passer facilement d'un potentiel défini suivant les systèmes de glissement à un potentiel défini par un tenseur pour le monocristal. Il suffit pour cela de considérer l'expression du potentiel des vitesses de déformation dans ces deux cas (2.63) et les relations (2.61a) et (2.62).

$$\dot{\gamma}_{(k)}^{(r)} = \frac{\partial \Phi_{(k)}^{(r)}}{\partial \tau_{(k)}^{(r)}} \quad \text{et} \quad \underline{\underline{\dot{\epsilon}}} = \frac{\partial u^{(r)}}{\partial \underline{\underline{\sigma}}^{(r)}} \quad (2.63)$$

On obtient alors l'égalité $u^{(r)}(\underline{\underline{\sigma}}) = \sum_k \Phi_{(k)}^{(r)}(\tau_{(k)}^{(r)})$. Cette relation montre que si les potentiels $\Phi_{(k)}^{(r)}$ sont strictement convexes le potentiel $u^{(r)}$ l'est également et on a alors une bijection entre le champ de contrainte et celui des taux de déformation. Ceci traduit qu'il n'existe, en fait, qu'une façon de choisir $\underline{\underline{\sigma}}$ à $\underline{\underline{\dot{\epsilon}}}$ donné.

La relation de convexité de $u^{(r)}$ s'obtient en considérant pour $\lambda \in [0; 1]$:

$$\Phi_{(k)}^{(r)} \left[(1 - \lambda) \tau_{(k)}^1 + \lambda \tau_{(k)}^2 \right] \leq (1 - \lambda) \Phi_{(k)}^{(r)}(\tau_{(k)}^1) + \lambda \Phi_{(k)}^{(r)}(\tau_{(k)}^2) \quad (2.64a)$$

$$\sum_k \Phi_{(k)}^{(r)} \left([(1 - \lambda) \underline{\underline{\sigma}}_1 + \lambda \underline{\underline{\sigma}}_2] : \underline{\underline{\mu}}_{(k)}^{(r)} \right) \leq \sum_k (1 - \lambda) \Phi_{(k)}^{(r)}(\underline{\underline{\sigma}}_1 : \underline{\underline{\mu}}_{(k)}^{(r)}) + \sum_k \lambda \Phi_{(k)}^{(r)}(\underline{\underline{\sigma}}_2 : \underline{\underline{\mu}}_{(k)}^{(r)}) \quad (2.64b)$$

$$u^{(r)} \left[(1 - \lambda) \underline{\underline{\sigma}}_1 + \lambda \underline{\underline{\sigma}}_2 \right] \leq (1 - \lambda) u^{(r)}(\underline{\underline{\sigma}}_1) + \lambda u^{(r)}(\underline{\underline{\sigma}}_2) \quad (2.64c)$$

Si u est strictement convexe, pour tous tenseurs de contrainte $\underline{\underline{\sigma}}_1 \neq \underline{\underline{\sigma}}_2$, on a les relations :

$$u(\underline{\underline{\sigma}}_2) - u(\underline{\underline{\sigma}}_1) > \left. \frac{\partial u}{\partial \underline{\underline{\sigma}}} \right|_{\underline{\underline{\sigma}}_2} : (\underline{\underline{\sigma}}_1 - \underline{\underline{\sigma}}_2) \quad (2.65a)$$

$$u(\underline{\underline{\sigma}}_1) - u(\underline{\underline{\sigma}}_2) > \left. \frac{\partial u}{\partial \underline{\underline{\sigma}}} \right|_{\underline{\underline{\sigma}}_1} : (\underline{\underline{\sigma}}_2 - \underline{\underline{\sigma}}_1) \quad (2.65b)$$

d'où

$$\left. \frac{\partial u}{\partial \underline{\underline{\sigma}}} \right|_{\underline{\underline{\sigma}}_1} : (\underline{\underline{\sigma}}_1 - \underline{\underline{\sigma}}_2) > \left. \frac{\partial u}{\partial \underline{\underline{\sigma}}} \right|_{\underline{\underline{\sigma}}_2} : (\underline{\underline{\sigma}}_1 - \underline{\underline{\sigma}}_2) \quad (2.66)$$

ce qui assure l'injectivité de la relation $\underline{\underline{\sigma}} \mapsto \dot{\underline{\underline{\varepsilon}}}$, en utilisant le même raisonnement sur le potentiel dual²⁰ de u , on montre qu'une relation bijective lie $\dot{\underline{\underline{\varepsilon}}}$ à $\underline{\underline{\sigma}}$.

Pour un monocristal quelconque rien ne prouve que tous les tenseurs taux de déformation soient réalisables lorsque l'on considère l'ensemble des taux de glissement possibles sur les différents systèmes. Pour pouvoir accommoder tous les taux de déformation d'un milieu continu, il faut que le monocristal possède cinq systèmes de glissement indépendants, condition qui est vérifiée pour nos matériaux cubiques. En effet, le taux de déformation étant isochore, son expression tensorielle comporte cinq paramètres indépendants. On peut s'en convaincre également en cherchant un exemple de systèmes de glissement permettant à un volume élémentaire d'accommoder tous les cisaillements et toutes les extensions incompressibles possibles : un tel exemple est représenté figure 2.7. A partir de cet exemple, on peut imaginer une base de

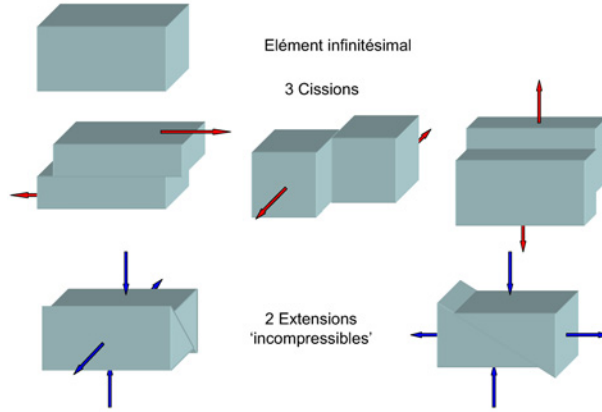


FIG. 2.7: Exemple de cinq systèmes permettant d'accommoder tout le tenseur des déformations incompressibles.

décomposition des tenseurs symétriques d'ordre deux de trace nulle (2.67).

$$\begin{pmatrix} a & c & d \\ c & b & e \\ d & e & -a-b \end{pmatrix} = \frac{e}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix} + \frac{d}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \end{pmatrix} + \frac{c}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \\ + \frac{a}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix} + \frac{b}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix} \quad (2.67)$$

Ces définitions permettent de représenter les tenseurs symétriques incompressibles dans un espace vectoriel normé de dimension cinq. On préfère en général travailler en repère orthonormé. On utilisera donc la

²⁰Ce potentiel dual se déduit de u par la transformée de Legendre-Fenchel qui conserve la convexité (annexe B), il est donc également strictement convexe.

notation de Lequeu [109] définie par les vecteurs de base (2.68).

$$\begin{aligned} \underline{e}_1 &= \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} -1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} & \underline{e}_2 &= \frac{1}{\sqrt{6}} \begin{pmatrix} -1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 2 \end{pmatrix} \\ \underline{e}_3 &= \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix} & \underline{e}_4 &= \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \end{pmatrix} & \underline{e}_5 &= \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \end{aligned} \quad (2.68a)$$

Cette représentation en dimension cinq sera adoptée dans la suite de ce travail aussi bien pour représenter les taux de déformation que pour les contraintes. Si ce choix est totalement justifié dans le cas du taux de déformation, c'est une simplification dans le cas de la contrainte. Certains auteurs [130] prennent en compte de façon explicite la pression hydrostatique qui constitue la sixième composante du tenseur des contraintes²¹.

Lorsque les monocristaux ne peuvent pas tous, individuellement, accommoder tout champ de déformation, c'est au polycristal, en tant qu'assemblage de monocristaux d'orientations différentes, de permettre de reproduire le taux de déformation macroscopique.

2.2.2 Traitement du problème d'homogénéisation non linéaire instantané

Si l'on considère que le lien entre le taux de glissement et la cission résolue est linéaire $\dot{\gamma}_{(k)} = 2\alpha_{(k)} \cdot \tau_{(k)}$ alors en utilisant les relations (2.61a) et (2.62) on peut écrire pour le monocristal r

$$\dot{\underline{\underline{\epsilon}}}^{(r)} = \mathbb{M}^{(r)} : \underline{\underline{\sigma}}^{(r)} \quad \text{avec} \quad \mathbb{M}^{(r)} = \sum_k 2\alpha_{(k)}^{(r)} \underline{\underline{\mu}}_{(k)}^{(r)} \otimes \underline{\underline{\mu}}_{(k)}^{(r)} \quad (2.69)$$

L'assemblage de ces monocristaux constitue donc un milieu hétérogène linéaire classique pour lequel les méthodes d'homogénéisation linéaires s'appliquent. La vraie difficulté supplémentaire vient en fait de la non linéarité de la relation liant τ à $\dot{\gamma}$. Le milieu devenant non linéaire, il n'est plus possible d'utiliser de principes de superposition pour représenter l'influence d'hétérogénéités sur les champs mécaniques. Ainsi, les seuls modèles considérés initialement en plasticité étaient les modèles en champs homogènes. Dans la suite de ce travail, nous ne considérerons que des comportements non linéaires dérivant d'un potentiel, et le potentiel considéré dans l'implémentation du modèle sera une loi puissance similaire à celle introduite par Hutchinson [82]. Nous allons présenter dans le paragraphe suivant quelques relations utiles sur les potentiels.

Cas des lois puissances :

Les relations présentées ici sont écrites sous forme tensorielle mais elles se transposent directement au cas scalaire des systèmes de glissement. Nous avons introduit précédemment (2.63) le potentiel des vitesses de glissement Φ et le potentiel des taux de déformation u ainsi que leur lien. Ces potentiels seront considérés strictement convexes (et souvent même plus que quadratiques) dans toute la suite de ce travail. Nous noterons que les principes variationnels (2.39) sont valides pour un potentiel non linéaire strictement convexe.

Nous appellerons loi puissance de degré n toute loi d'écoulement dérivant d'un potentiel u homogène de degré $n + 1$, c'est-à-dire vérifiant (2.70) (en prenant $\lambda \geq 0$ pour simplifier)

$$u(\lambda \underline{\underline{\sigma}}) = \lambda^{n+1} u(\underline{\underline{\sigma}}) \quad (2.70)$$

Dans notre cas nous utiliserons une loi puissance de la forme (2.71) à l'échelle locale où r est la famille d'orientations et k le système de glissement considéré.

$$\Phi_{(k)}^{(r)}(\tau) = \frac{\dot{\gamma}_{0(k)}^{(r)} \tau_{c(k)}^{(r)}}{n_{(k)}^{(r)} + 1} \left[\frac{|\tau|}{\tau_{c(k)}^{(r)}} \right]^{n_{(k)}^{(r)} + 1} \quad \text{avec } n_{(k)}^{(r)} \geq 1 \quad (2.71)$$

²¹Cette composante intervient alors dans les équations d'équilibre et est déterminée à l'aide d'un multiplicateur de Lagrange associé à la condition d'incompressibilité.

On rappelle brièvement quelques propriétés sur ces potentiels homogènes qui sont respectivement l'homogénéité des dérivées (2.72) et le théorème d'Euler (2.73).

$$\left. \frac{\partial u}{\partial \underline{\underline{\sigma}}} \right|_{\lambda \underline{\underline{\sigma'}}} = \lambda^n \left. \frac{\partial u}{\partial \underline{\underline{\sigma}}} \right|_{\underline{\underline{\sigma'}}} \quad ; \forall i \in \llbracket 1, n+1 \rrbracket \quad \left. \frac{\partial^i u}{(\partial \underline{\underline{\sigma}})^i} \right|_{\lambda \underline{\underline{\sigma'}}} = \lambda^{n+1-i} \left. \frac{\partial^i u}{(\partial \underline{\underline{\sigma}})^i} \right|_{\underline{\underline{\sigma'}}} \quad (2.72)$$

$$\left. \frac{\partial u}{\partial \underline{\underline{\sigma}}} \right|_{\lambda \underline{\underline{\sigma'}}} : \underline{\underline{\sigma'}} = (n+1) \lambda^n u(\underline{\underline{\sigma'}}) \quad ; \forall i \in \llbracket 1, n+1 \rrbracket \quad \left. \frac{\partial^i u}{(\partial \underline{\underline{\sigma}})^i} \right|_{\lambda \underline{\underline{\sigma'}}} (: \underline{\underline{\sigma'}})^i = \frac{(n+1)!}{(n+1-i)!} \lambda^{n+1-i} u(\underline{\underline{\sigma'}}) \quad (2.73)$$

Un tel potentiel local conduit à un potentiel effectif de même homogénéité. En effet, si (2.70) est vérifiée en tout point, elle l'est également pour la moyenne sur tout le VER. De plus, si le champ $\underline{\underline{\sigma}}(\underline{x})$ est statiquement admissible pour la contrainte macroscopique $\underline{\underline{\Sigma}}$, par linéarité des conditions d'admissibilité, $\lambda \underline{\underline{\sigma}}(\underline{x})$ est statiquement admissible pour $\lambda \underline{\underline{\Sigma}}$. On en déduit donc :

$$\tilde{u}(\lambda \underline{\underline{\Sigma}}) = \min_{\underline{\underline{\sigma}} \in \mathcal{S}^m(\underline{\underline{\Sigma}})} \langle u(\lambda \underline{\underline{\sigma}}) \rangle = \lambda^{n+1} \min_{\underline{\underline{\sigma}} \in \mathcal{S}^m(\underline{\underline{\Sigma}})} \langle u(\underline{\underline{\sigma}}) \rangle = \lambda^{n+1} \tilde{u}(\underline{\underline{\Sigma}}) \quad (2.74)$$

2.2.2.a Modèle statique et modèle de type Taylor

On parle respectivement de modèle de Taylor [194] et de modèle statique lorsque les champs de taux de déformation ou de contraintes sont supposés homogènes dans le polycristal.

Si le comportement des systèmes de glissement dérive d'un potentiel, ces modèles en champ homogène se déduisent simplement des formulations variationnelles (2.39). La seule difficulté qui peut apparaître dans le cas du modèle de Taylor est liée au fait qu'en tout point le milieu doit pouvoir accommoder un taux de déformation quelconque; les monocristaux doivent donc présenter au moins cinq systèmes de glissement indépendants. Si ce n'est pas le cas, la méthode de Taylor ne peut pas s'appliquer sous sa forme classique. De plus, même lorsque les systèmes indépendants existent, il peut être nécessaire, pour obtenir de meilleurs résultats, d'assouplir un peu la forme du champ de déplacement afin d'obtenir de meilleures prévisions de texture. On peut alors avoir recours à des modèles dérivés de Taylor qui relaxent certaines composantes du tenseur des taux de déformation en fonction de critères géométriques sur la forme des grains ou sur l'agencement de groupes de grains et sur la distribution des champs dans ces éléments. Nous citerons, pour mémoire, les différentes versions du modèle "Relaxed Constraints" décrit par exemple dans [198, 97], les modèles LAMEL [202, 201] et ALAMEL [204, 203] de Van Houtte ou encore le modèle "Constrained Hybrid" de [144, 107].

Dans la suite les modèles baptisés, historiquement, modèle de Taylor et modèle statique seront désignés sous les appellations de modèle de Voigt et modèle de Reuss, du fait de l'identité de ces descriptions en termes de formulation variationnelle.

2.2.2.b Modèle incrémental de Hill et modèle sécant

Les méthodes en champ homogène permettent certes d'obtenir des bornes pour le comportement mais ces bornes restent éloignées pour des milieux contrastés. Il était nécessaire, afin de fournir de meilleures bornes et estimations, de transposer les méthodes plus sophistiquées de l'homogénéisation linéaire au cas non linéaire. Pour cela, Hill [77] propose de se ramener à un problème d'élasticité en linéarisant de façon incrémentale le comportement, cette méthode générale va maintenant être décrite de façon plus détaillée en reprenant les arguments de [82] et [123].

L'idée de Hill consiste à dire qu'à tout niveau de contrainte le comportement non linéaire du milieu hétérogène peut être linéarisé à l'aide de modules tangents (2.75).

$$d\underline{\underline{\dot{\epsilon}}}(\underline{x}) = \mathbb{M}(\underline{x}) : d\underline{\underline{\sigma}}(\underline{x}) \quad (2.75)$$

On peut alors utiliser sur ce matériau hétérogène linéaire $\mathbb{M}(\underline{x})$ les méthodes d'homogénéisation classiques pour un niveau de contrainte donné, faire évoluer le milieu à partir des champs ainsi calculés et itérer le processus jusqu'à l'état de sollicitation visé.

Dans l'absolu, la linéarisation devrait donner des résultats différents en tout point des monocristaux, du fait de l'inhomogénéité des champs mécaniques locaux, mais une telle représentation nous fait perdre le concept même de phase, de plus son équivalence avec le problème non linéaire initial rend ce problème

linéaire tout aussi difficile à résoudre. Afin de conserver à la fois le comportement linéaire et l'aspect assemblage de phases homogènes, le comportement linéarisé peut être simplifié en supposant un comportement homogène par phase pouvant s'interpréter comme un "comportement linéaire moyen" de la phase. Il est naturel de conserver la structure en familles d'orientations du matériau polycristallin, ce qui nous conduit à définir un module linéarisé par famille d'orientations.

Il faut maintenant définir la méthode de "linéarisation en moyenne", la proposition initiale de Hill est de considérer le comportement tangent évalué pour la moyenne des champs de contrainte dans la phase.

$$\mathbb{M}^{(r)} \left(\langle \underline{\underline{\sigma}} \rangle_r \right) = \frac{\partial^2 u}{\partial \underline{\underline{\sigma}} \partial \underline{\underline{\sigma}}} \bigg|_{\langle \underline{\underline{\sigma}} \rangle_r} \quad (2.76)$$

Il est clair que d'autres possibilités pourraient exister pour définir cette souplesse. Nous allons maintenant observer ce que donne cette procédure lorsque l'on se place dans le cas d'une loi puissance définie précédemment.

Dans le cadre de la formulation incrémentale, on considère connu l'état des champs mécaniques après l'application d'une contrainte macroscopique $\underline{\underline{\Sigma}}$ et on s'intéresse à l'influence d'un incrément de contrainte supplémentaire $d\underline{\underline{\Sigma}}$. Le premier problème à résoudre est donc la concentration de cette sollicitation dans le matériau considéré linéaire au voisinage de $\underline{\underline{\Sigma}}$ c'est-à-dire :

$$d\underline{\underline{\sigma}}(\underline{x}) = \mathbb{B}(\underline{x}) : d\underline{\underline{\Sigma}}(\underline{x}) \quad (2.77)$$

Nous faisons comme annoncé précédemment l'hypothèse d'homogénéité du comportement par morceau. Celui-ci est donné par (2.76) et permet la définition des tenseurs de localisation à partir d'un modèle d'homogénéisation linéaire à préciser.

Considérons, par exemple, que l'on parte d'un état sans contraintes pour arriver à l'état de sollicitation macroscopique $\underline{\underline{\Sigma}}_0$. Notre comportement dérivant d'un potentiel, il est indépendant du trajet de chargement choisi pour arriver à l'état final, on va donc considérer un chargement progressif de la forme $\underline{\underline{\Sigma}} = \lambda \underline{\underline{\Sigma}}_0$ avec λ nul pour l'état initial et égal à un à l'état final. Les champs locaux seront donc tous fonctions de ce paramètre λ . La relation (2.77) devient alors en moyenne :

$$\langle d\underline{\underline{\sigma}} \rangle_r(\lambda) = d\lambda \mathbb{B}^{(r)}(\lambda) : \underline{\underline{\Sigma}}_0 = d\lambda \frac{\partial \langle \underline{\underline{\sigma}} \rangle_r}{\partial \lambda} \quad (2.78a)$$

$$\frac{\partial \langle \underline{\underline{\sigma}} \rangle_r}{\partial \lambda} = \mathbb{B}^{(r)}(\lambda) : \underline{\underline{\Sigma}}_0 \quad (2.78b)$$

Dans le cas des modèles d'homogénéisation linéaires considérés précédemment, nous allons nous restreindre à ceux qui présentent une localisation homogène de degré 0. Cette propriété permet de rendre le second membre de (2.78b) indépendant du paramètre λ . En effet, si l'on considère $\langle \underline{\underline{\sigma}} \rangle_r(\lambda) = \lambda \langle \underline{\underline{\sigma}} \rangle_r$ le tenseur de localisation s'écrit avec cette hypothèse et en utilisant l'homogénéité de degré $n-1$ du tenseur des souplesses (2.72).

$$\mathbb{B}^{(r)}(\lambda) = \mathbb{B}^{(r)} \left(\mathbb{M}^1 \left(\lambda \langle \underline{\underline{\sigma}} \rangle_1 \right), \dots, \mathbb{M}^N \left(\lambda \langle \underline{\underline{\sigma}} \rangle_1 \right) \right) \quad (2.79a)$$

$$= \mathbb{B}^{(r)} \left(\lambda^{n-1} \mathbb{M}^1 \left(\langle \underline{\underline{\sigma}} \rangle_1 \right), \dots, \lambda^{n-1} \mathbb{M}^N \left(\langle \underline{\underline{\sigma}} \rangle_1 \right) \right) \quad (2.79b)$$

$$= \mathbb{B}^{(r)} \left(\mathbb{M}^1 \left(\langle \underline{\underline{\sigma}} \rangle_1 \right), \dots, \mathbb{M}^N \left(\langle \underline{\underline{\sigma}} \rangle_1 \right) \right) \quad (2.79c)$$

$$= \mathbb{B}^{(r)} \quad (2.79d)$$

on peut donc intégrer directement l'équation (2.78b) au cours de la sollicitation

$$\langle \underline{\underline{\sigma}} \rangle_r = \lambda \mathbb{B}^{(r)} : \underline{\underline{\Sigma}}_0 \quad (2.80)$$

soit pour le niveau de contrainte final

$$\langle \underline{\underline{\sigma}} \rangle_r = \mathbb{B}^{(r)} : \underline{\underline{\Sigma}}_0 \quad (2.81)$$

Ce qui est cohérent avec la forme conjecturée pour $\langle \underline{\underline{\sigma}} \rangle_r$. Ces expressions constituent donc une solution du problème (2.78b), ce problème étant linéaire avec des conditions initiales fixées sa solution est unique, c'est donc (2.81).

La définition des comportements locaux adoptés dans le cadre de ce modèle nous permet d'intégrer de même le taux de déformation.

$$d\langle \dot{\underline{\underline{\epsilon}}} \rangle_r = \mathbb{M}^{(r)} \left(\lambda \langle \underline{\underline{\sigma}} \rangle_r \right) : d\langle \underline{\underline{\sigma}} \rangle_r \quad (2.82a)$$

$$\frac{\partial \langle \dot{\underline{\underline{\epsilon}}} \rangle_r}{\partial \lambda} = \mathbb{M}^{(r)} \left(\lambda \langle \underline{\underline{\sigma}} \rangle_r \right) : \mathbb{B}^{(r)} : \underline{\underline{\Sigma}}_0 = \lambda^{n-1} \mathbb{M}^{(r)} \left(\langle \underline{\underline{\sigma}} \rangle_r \right) : \mathbb{B}^{(r)} : \underline{\underline{\Sigma}}_0 \quad (2.82b)$$

$$\langle \dot{\underline{\underline{\epsilon}}} \rangle_r = \frac{\lambda^n}{n} \mathbb{M}^{(r)} \left(\langle \underline{\underline{\sigma}} \rangle_r \right) : \mathbb{B}^{(r)} : \underline{\underline{\Sigma}}_0 \quad (2.82c)$$

Soit à l'instant final

$$\langle \dot{\underline{\underline{\epsilon}}} \rangle_r = \frac{1}{n} \mathbb{M}^{(r)} \left(\langle \underline{\underline{\sigma}} \rangle_r \right) : \langle \underline{\underline{\sigma}} \rangle_r \quad (2.83)$$

Ainsi, dans le cas d'une loi puissance associée à un modèle d'homogénéisation conduisant à des tenseurs de localisation homogènes de degré 0 par rapport aux modules, la formulation incrémentale peut s'écrire sous forme intégrée ou totale à l'aide d'une expression "sécante" où le module sécant est donné par le rapport du module tangent par l'exposant n . Ce modèle sera désigné sous l'appellation de modèle sécant dans la suite.

Ce résultat rappelle que dans le cas d'un comportement non héréditaire, il est inutile de recourir à une formulation incrémentale. Et, dans le cas d'une loi puissance, pour un modèle d'homogénéisation linéaire vérifiant (2.79), la procédure de Hill s'identifie à une linéarisation totale sécante. Malgré tout, on peut espérer obtenir de meilleurs résultats en utilisant un autre type de linéarisation totale à l'échelle locale, telle par exemple, une linéarisation tangente ou affine. En effet, ce type de linéarisation permet de mieux approcher localement le comportement pour les points de la phase r présentant un état de contrainte différent de l'état moyen, une linéarisation tangente serait en ce sens optimale.

Remarque 1 : Condition d'homogénéité sur la localisation

\mathbb{P}^0 , tout comme \mathbb{I}^0 , sont homogènes de degré -1 comme le suggère l'équation (2.19). Ainsi \mathbb{C}^* est homogène de degré 1 en \mathbb{C}^0 . Pour que les tenseurs de localisation issus de la formulation de Hashin et Shtrikman soient homogènes de degré 0 au sens évoqué en (2.79), il suffit, au vu de (2.84), que \mathbb{C}^0 soit linéairement dépendant des $\mathbb{C}^{(r)}$, ce qui est le cas en particulier du modèle auto-cohérent et des estimations de Willis/Hashin-Shtrikman.

$$\mathbb{A}^{(r)} = \left[\mathbb{C}^* (\mathbb{C}^0) + \mathbb{C}^{(r)} \right] : \left[\sum_s c^s \left(\mathbb{C}^* (\mathbb{C}^0) + \mathbb{C}^{(s)} \right)^{-1} \right]^{-1} \quad (2.84)$$

En fait, en considérant la linéarité des conditions d'admissibilité (2.18) et l'unicité des solutions dans un cadre élastique linéaire, on s'aperçoit qu'un modèle d'homogénéisation soumis à ces contraintes doit toujours fournir des tenseurs de localisations homogènes de degré 1 (en ce sens les modèles de Voigt et Reuss ne sont pas satisfaisants).

Remarque 2 : Choix du modèle linéaire pour un matériau polycristallin

Dans le cas d'un polycristal, l'absence d'une phase, c'est-à-dire ici d'une famille d'orientations, jouant clairement le rôle de matrice nous oriente vers un modèle auto-cohérent. Cette approche sera d'autant mieux adaptée que chaque grain sera entouré d'une large variété de voisins caractérisant la diversité des orientations présentes dans le matériau. Dans l'approche classique décrite ici, nous avons vu que le modèle auto-cohérent, tout comme les autres modèles issus de la formulation de Hashin et Shtrikman, se basait sur la définition d'un unique tenseur microstructural $\underline{\underline{Z}}$ (supposant une symétrie de répartition ellipsoïdale).

La question est alors de savoir à quoi connecter ce paramètre microstructural. Il peut être tentant de rapprocher cette notion de la forme moyenne des grains. Il est clair tout d'abord que ce lien est totalement justifié pour des grains globalement équiaxes présentant une distribution aléatoire de leur orientation dans le volume. Ce point de vue reste valable lorsque l'on impose une transformation homogène à ce matériau. D'autre part, ce rapprochement est également pertinent si la distance de décorrélation est de l'ordre de la taille de grain, car alors la fonction d'auto-corrélation moyenne en quelque sorte la forme de chaque grain, alors que les fonctions de corrélation croisées sont quasiment nulles²².

²²On peut donc leur attribuer la symétrie de notre choix.

Si la symétrie de répartition des orientations dépend des familles d'orientations, ou si celle-ci a une géométrie bien particulière, rien n'assure que le tenseur $\underline{\underline{Z}}$ puisse être encore rapproché de la forme des grains. Malgré tout, la difficulté de mesurer les fonctions de corrélation pour les orientations nous incite souvent à faire la simplification que la forme des grains définit la symétrie de $\underline{\underline{Z}}$.

2.2.2.c Modèles tangent et affine

La formulation tangente [130, 103] se base sur l'idée d'utiliser une formulation totale mieux adaptée que la formulation sécante et considère aussi bien à l'échelle locale qu'à l'échelle macroscopique les relations (2.85) et (2.86).

$$\dot{\underline{\underline{E}}} = \mathbb{M}^{(r)} : \underline{\underline{\sigma}} + \underline{\underline{d}}_0^{(r)} \quad \text{avec} \quad \mathbb{M}^{(r)} = \left. \frac{\partial^2 u}{\partial \underline{\underline{\sigma}} \partial \underline{\underline{\sigma}}} \right|_{\langle \underline{\underline{\sigma}} \rangle_r} \quad \text{et} \quad \underline{\underline{d}}_0^{(r)} = \left. \frac{\partial u}{\partial \underline{\underline{\sigma}}} \right|_{\langle \underline{\underline{\sigma}} \rangle_r} - \left. \frac{\partial^2 u}{\partial \underline{\underline{\sigma}} \partial \underline{\underline{\sigma}}} \right|_{\langle \underline{\underline{\sigma}} \rangle_r} : \langle \underline{\underline{\sigma}} \rangle_r \quad (2.85)$$

$$\dot{\underline{\underline{E}}} = \tilde{\mathbb{M}} : \underline{\underline{\Sigma}} + \underline{\underline{D}}_0 \quad \text{avec} \quad \tilde{\mathbb{M}} = \left. \frac{\partial^2 \tilde{u}}{\partial \underline{\underline{\Sigma}} \partial \underline{\underline{\Sigma}}} \right|_{\underline{\underline{\Sigma}}} \quad \text{et} \quad \underline{\underline{D}}_0 = \left. \frac{\partial \tilde{u}}{\partial \underline{\underline{\Sigma}}} \right|_{\underline{\underline{\Sigma}}} - \left. \frac{\partial^2 \tilde{u}}{\partial \underline{\underline{\Sigma}} \partial \underline{\underline{\Sigma}}} \right|_{\langle \underline{\underline{\Sigma}} \rangle_r} : \langle \underline{\underline{\Sigma}} \rangle_r \quad (2.86)$$

En écrivant ces expressions les auteurs supposent la compatibilité de ces formulations tangentes aux deux échelles, ce qui n'est pas assuré a priori. De plus, cette formulation nécessite de connaître à l'avance la forme du potentiel effectif, ce qui a limité son utilisation aux lois puissances pour lesquelles l'homogénéité du potentiel effectif est connue. A contrario, Masson [123, 124] a utilisé une linéarisation tangente à l'échelle locale mais a appliqué les relations classiques d'homogénéisation des milieux thermo-élastiques [215, 124]

$$\tilde{\mathbb{M}} = \langle \mathbb{M} : \mathbb{B} \rangle \quad (2.87a)$$

$$\underline{\underline{D}}_0 = \langle \underline{\underline{d}}_0 : \mathbb{B} \rangle \quad (2.87b)$$

pour caractériser le matériau à l'échelle macroscopique. Le comportement à cette échelle, bien que s'écrivant toujours sous la forme :

$$\dot{\underline{\underline{E}}} = \tilde{\mathbb{M}} : \underline{\underline{\Sigma}} + \underline{\underline{D}}_0 \quad (2.88)$$

n'a pas de raison d'être tangent au comportement non linéaire macroscopique ; c'est ce qui vaut à cette méthode le qualificatif d'anne.

L'hypothèse de tangence de [130, 103] impose à la formulation du même nom un comportement particulier pour les fortes non linéarités. En effet, dans le cas de l'implémentation auto-cohérente, on montre en suivant [103] ou [124], que l'équation de localisation utilisée tend à imposer $\langle \underline{\underline{\sigma}} \rangle_r \approx \underline{\underline{\Sigma}}$, ce qui explique l'adoucissement observé par rapport aux autres linéarisations, car on se rapproche alors de la configuration de Reuss. Il est à noter que cette approche tangente n'est pas tout à fait dans la logique d'une approche micromécanique, car elle intègre des hypothèses à la fois à l'échelle locale et à l'échelle macroscopique. Cette spécificité est parfois considérée comme un manque de cohérence interne du modèle.

On pourrait croire que ces modèles closent le sujet du choix de la méthode de linéarisation à utiliser. En fait il n'en est rien, car si les modèles présentés jusqu'à maintenant ont choisi d'estimer les comportement locaux à partir des moyennes par phases, rien ne nous oblige à faire un tel choix. On peut même montrer que ce choix n'est en général pas optimal et "raidit" souvent le comportement effectif (voir par exemple [23] dans le cas isotrope). Pour se convaincre du caractère "arbitraire" de la définition des modules à partir des champs moyens, on peut remarquer :

$$\dot{\underline{\underline{E}}} = \sum_r c^r \langle \dot{\underline{\underline{E}}} \rangle_r = \sum_r c^r \left\langle \left. \frac{\partial u}{\partial \underline{\underline{\sigma}}} \right|_{\dot{\underline{\underline{E}}}} \right\rangle \neq \sum_r c^r \left. \frac{\partial u}{\partial \underline{\underline{\sigma}}} \right|_{\langle \dot{\underline{\underline{E}}} \rangle_r} \quad (2.89)$$

Une écriture variationnelle du problème non linéaire peut permettre d'éviter de faire ce choix a priori, lors de la définition du milieu linéaire à utiliser.

On peut noter que, comme dans le cas des formulations d'homogénéisation linéaires "ad-hoc", ces techniques de linéarisation ne permettent pas de savoir si l'on surévalue ou si l'on sous-évalue le comportement réel ; c'est également une information qui deviendra accessible à partir des formulations variationnelles.

2.2.2.d Formulation variationnelle de Talbot et Willis

Une extension du principe variationnel de Hashin et Shtrikman au cas non linéaire a été proposée initialement par Talbot et Willis [190]. Cette formulation se base sur le choix d'un potentiel $w_0(\underline{\dot{\epsilon}}) = 1/2\mathbb{C}^0 :: (\underline{\dot{\epsilon}} \otimes \underline{\dot{\epsilon}})$, associé à un milieu linéaire homogène de module \mathbb{C}^0 , auquel comparer le potentiel des dissipations $w(\underline{\dot{\epsilon}})$ du milieu hétérogène non linéaire que nous considérons. Supposons que l'on puisse choisir w_0 de façon à ce que $(w - w_0)(\underline{\dot{\epsilon}})$ soit concave; la transformée de Legendre-Fenchel concave (annexe B) donne alors les relations (2.90).

$$(w - w_0)_*(\underline{\tau}) = \inf_{\underline{\dot{\epsilon}}} \{ \underline{\tau} : \underline{\dot{\epsilon}} - (w - w_0)(\underline{\dot{\epsilon}}) \} \quad (2.90a)$$

$$(w - w_0)_{**}(\underline{\dot{\epsilon}}) = (w - w_0)(\underline{\dot{\epsilon}}) = \inf_{\underline{\tau}} \{ \underline{\tau} : \underline{\dot{\epsilon}} - (w - w_0)_*(\underline{\tau}) \} \quad (2.90b)$$

Cette dernière égalité provenant de l'involution de la transformée lorsque la fonctionnelle de départ est concave. Cette identité permet de reformuler la formulation variationnelle classique (2.39) sous la forme (2.91).

$$\bar{w}(\underline{\dot{E}}) = \min_{\underline{\dot{\epsilon}}^* \in \mathcal{C}^m(\underline{\dot{E}})} \left\{ \langle w_0(\underline{\dot{\epsilon}}^*(\underline{x})) \rangle + \left\langle \inf_{\underline{\tau}} [\underline{\tau}(\underline{x}) : \underline{\dot{\epsilon}}^*(\underline{x}) - (w - w_0)_*(\underline{\tau}(\underline{x}))] \right\rangle \right\} \quad (2.91a)$$

$$= \inf_{\underline{\tau}} \left\{ \min_{\underline{\dot{\epsilon}}^* \in \mathcal{C}^m(\underline{\dot{E}})} \langle w_0(\underline{\dot{\epsilon}}^*(\underline{x})) + \underline{\tau}(\underline{x}) : \underline{\dot{\epsilon}}^*(\underline{x}) - \langle (w - w_0)_*(\underline{\tau}(\underline{x})) \rangle \right\} \quad (2.91b)$$

où la minimisation sur le champ des taux de déformation admissibles fait intervenir un problème d'inclusion fictif lorsque $\underline{\tau}$ est considéré constant par morceaux.

Dans le cas où l'hypothèse de concavité de $w - w_0$ n'est vérifiée qu'à l'infini, l'involution de la transformée de Legendre-Fenchel n'est pas respectée ($w(\underline{\dot{\epsilon}}) - w_0(\underline{\dot{\epsilon}}) \leq (w - w_0)_{**}(\underline{\dot{\epsilon}})$) et la formulation précédente fournit une borne haute pour le comportement. Dans le cas convexe ou convexe à l'infini un raisonnement similaire peut être mené.

Il est à noter que le potentiel non linéaire est toujours comparé à un potentiel quadratique; nous ne pouvons donc obtenir qu'une borne supérieure ou qu'une borne inférieure, respectivement pour un comportement moins que quadratique à l'infini et pour un comportement plus que quadratique à l'infini (seul un w également quadratique et donc un comportement linéaire permettrait de générer des différences $w - w_0$ tour à tour concaves et convexes). Il est à noter que la formulation duale, en contrainte, existe mais fournit la même borne. Dans le cas où le potentiel est linéaire, on peut vérifier que la formulation de Talbot et Willis s'identifie à la formulation de Hashin et Shtrikman et que les conditions de convexité et de concavité à l'infini redonnent les conditions sur le milieu de référence \mathbb{C}^0 pour obtenir les bornes de Hashin et Shtrikman.

L'application de cette méthode dans le cas polycristallin a été réalisée par [46] et complétée par une seconde borne dans [214], en utilisant une méthode décrite en [192, 193].

Cette formulation variationnelle dispense l'utilisateur de faire un choix de linéarisation. Mais cette procédure a été "supplanteée" dans le cas de potentiels de "carré convexe" par une formulation plus simple et permettant d'utiliser d'autres modèles d'homogénéisation linéaires que ceux basés sur la formulation variationnelle de Hashin et Shtrikman.

2.2.2.e Formulation variationnelle de Ponte Castañeda

La formulation variationnelle de Ponte Castañeda [152] permet, quant à elle, d'utiliser un composite linéaire de comparaison au lieu d'un milieu linéaire homogène de comparaison soumis à un champ de polarisation comme dans le modèle précédent. L'avantage d'une telle forme est de permettre d'utiliser une information microstructurale plus riche associée à d'autres modèles d'homogénéisation linéaire que ceux dérivés de la formulation variationnelle de Hashin et Shtrikman.

L'idée de Ponte Castañeda est de laisser à l'utilisateur le choix du modèle d'homogénéisation linéaire qu'il souhaite employer, en faisant apparaître directement un problème de milieu hétérogène linéaire. Nous allons nous placer dans le cadre scalaire pour lequel cette méthode a été définie initialement [152,

154, 153, 161] en supposant que le potentiel n'est fonction que de l'équivalent du taux de déformation au sens de von Mises :

$$\dot{\varepsilon}_{\text{eq.}} = \sqrt{\frac{2}{3} \left(\underline{\dot{\varepsilon}} - \frac{1}{3} \text{tr}(\underline{\dot{\varepsilon}}) \underline{\underline{1}} \right) : \left(\underline{\dot{\varepsilon}} - \frac{1}{3} \text{tr}(\underline{\dot{\varepsilon}}) \underline{\underline{1}} \right)} \quad (2.92)$$

Afin d'arriver au résultat voulu, l'auteur fait l'hypothèse que le potentiel $w(\dot{\varepsilon}_{\text{eq.}})$ est de carré concave²³, c'est-à-dire qu'il peut s'écrire $f(\varepsilon_{\text{eq.}}^2)$ avec f concave sur \mathbb{R}_+ , $f(0) = 0$ et $f(p) \xrightarrow{p \rightarrow +\infty} +\infty$ (on peut prendre $f(x) = -\infty$ pour $x < 0$). La transformée de Legendre-Fenchel concave donne alors :

$$f_*(q) = \inf_p \{pq - f(p)\} = \inf_{p \geq 0} \{pq - f(p)\} = -v(q) \quad (2.93)$$

f_* est concave et vaut $-\infty$ pour $q \leq 0$. L'application de la transformation une seconde fois nous donne :

$$f_{**}(p) = f(p) = \inf_{q \geq 0} \{pq - f_*(q)\} \quad (2.94)$$

En prenant $q = \frac{3}{2}\mu$ et $p = \varepsilon_{\text{eq.}}^2$, on a donc reformulé le problème en faisant apparaître une énergie de milieu linéaire isotrope.

$$w(\underline{\dot{\varepsilon}}) = \inf_{\mu \geq 0} \left\{ \frac{3}{2} \mu \dot{\varepsilon}_{\text{eq.}}^2 - f_*\left(\frac{3}{2}\mu\right) \right\} \quad (2.95a)$$

$$\tilde{w}(\underline{\dot{\varepsilon}}) = \text{Min}_{\underline{\dot{\varepsilon}} \in \mathcal{C}^m(\underline{\dot{\varepsilon}})} \left\langle \inf_{\mu(\underline{x}) \geq 0} \left[\frac{3}{2} \mu(\underline{x}) \dot{\varepsilon}_{\text{eq.}}^2(\underline{x}) - f_*\left(\frac{3}{2}\mu(\underline{x})\right) \right] \right\rangle \quad (2.95b)$$

$$= \inf_{\mu(\underline{x}) \geq 0} \left\{ \text{Min}_{\underline{\dot{\varepsilon}} \in \mathcal{C}^m(\underline{\dot{\varepsilon}})} \left\langle w_0(\mu(\underline{x}), \underline{\dot{\varepsilon}}) \right\rangle - \left\langle f_*\left(\frac{3}{2}\mu(\underline{x})\right) \right\rangle \right\} \quad (2.95c)$$

où l'optimisation sur $\underline{\dot{\varepsilon}}$ constitue un problème d'homogénéisation linéaire. Suquet [189, 161] a montré que cette procédure variationnelle coïncidait avec un modèle sécant où l'estimation des modules est réalisée, non plus à partir de la moyenne des champs, mais à partir de leur seconds moment²⁴.

Ponte Castañeda et Willis ont montré que les résultats obtenus avec cette méthode, dans le cadre de la formulation linéaire de Hashin et Shtrikman, pouvaient être retrouvés à partir de la méthode de linéarisation proposée précédemment et que la formulation variationnelle de Talbot et Willis fournissait de meilleurs résultats dans le cas où l'hypothèse de convexité "au carré" n'était pas vérifiée [212, 213, 163]. Talbot et Willis ont, en outre, proposé une version hybride de leur formulation variationnelle permettant d'utiliser à la fois un composite linéaire de comparaison et des polarisations [191, 214]. Les bornes fournies dans ce cadre sont, en général, identiques à celles obtenues à l'aide de la formulation de Ponte Castañeda. Ce dernier explique [151] cette similarité en remarquant que dans la plupart des cas :

$$\left(w^{(r)} - w_0^{(r)} \right)_{**}(\underline{\dot{\varepsilon}}^{(r)}) \stackrel{""}{=} \sup_{\underline{\dot{\varepsilon}}} \left\{ w^{(r)}(\underline{\dot{\varepsilon}}) - w_0^{(r)}(\underline{\dot{\varepsilon}}) \right\} \quad (2.96)$$

où le premier membre intervient dans la formulation hybride de Talbot et Willis et le second dans la procédure variationnelle de Ponte Castañeda, ce qu'il représente schématiquement par la figure 2.8. Afin d'atteindre des estimations potentiellement plus fines Ponte Castañeda et Willis [164] proposent de ne plus utiliser une transformée de Legendre-Fenchel conduisant à une convexification comme à la figure 2.8 mais de considérer une transformation stationnaire qui sera présentée dans la suite.

La formulation variationnelle de Ponte Castañeda a tout d'abord été utilisée, dans le cas des polycristaux, par [43]. Une estimation de type auto-cohérent a été proposée ensuite par [160, 136, 135, 137, 67, 116] afin d'approcher le comportement de divers matériaux cristallins. Le statut de borne supérieure de cette formulation variationnelle a permis de montrer que d'autres estimations auto-cohérentes, obtenues pour des méthodes de linéarisation différentes, ne respectaient pas cette borne et étaient donc à proscrire. Ce modèle de linéarisation propose donc beaucoup d'avantages, néanmoins son statut de borne haute²⁵ a incité certains auteurs à rechercher une formulation plus souple afin de fournir de meilleures estimations.

²³Cette hypothèse de concavité est vérifiée dans le cas du potentiel que nous utiliserons par la suite.

²⁴Ce qui se retrouve en écrivant les conditions d'optimalité sur μ homogène par morceau et sur $\underline{\dot{\varepsilon}}$.

²⁵L'utilisation de champs de modules homogènes par morceaux dans (2.95c) conduit à une borne supérieure pour \tilde{w} .

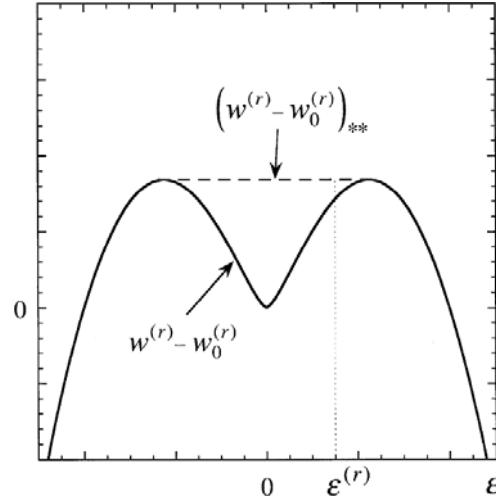


FIG. 2.8: Représentation schématique de l'égalité (2.96) vérifiée en général, d'après [151] (le domaine où l'égalité est vérifiée est représenté en traits discontinus).

2.2.2.f Modèles au second ordre

Ponte Castañeda [155] a proposé une formulation générale, incluant la formulation affine décrite précédemment et permettant de reproduire le développement au second ordre en contraste de Suquet [188], ce que ne permet pas la formulation variationnelle précédente. Pour ce faire, l'auteur a introduit un potentiel thermo-élastique de référence (2.97) de la forme la plus générale possible, où $\hat{\underline{\underline{\varepsilon}}}$ et \mathbb{L}_0 sont des champs (non nécessairement homogènes).

$$w_T(\hat{\underline{\underline{\varepsilon}}}) = w\left(\hat{\underline{\underline{\varepsilon}}}\right) + \frac{\partial w}{\partial \hat{\underline{\underline{\varepsilon}}}} \Big|_{\hat{\underline{\underline{\varepsilon}}}} : (\hat{\underline{\underline{\varepsilon}}} - \hat{\underline{\underline{\varepsilon}}}) + \frac{1}{2} (\hat{\underline{\underline{\varepsilon}}} - \hat{\underline{\underline{\varepsilon}}}) : \mathbb{L}_0 : (\hat{\underline{\underline{\varepsilon}}} - \hat{\underline{\underline{\varepsilon}}}) \quad (2.97)$$

Un statut variationnel a pu être donné à cette formulation [164] en étendant la formulation hybride de Talbot et Willis déjà évoquée. Cette formulation variationnelle a la particularité de ne pas être basée sur la transformée de Legendre-Fenchel classique qui conduit, comme on l'a vu, à une convexification de $w^{(r)} - w_0^{(r)}$ (figure 2.8), limitant l'exploration de cette fonction et limitant donc la précision des estimations. L'utilisation d'une transformation stationnaire²⁶ de la forme (2.98)

$$f^*(y) = \text{Stat}_x \{xy - f(x)\} \quad f(x) = \text{Stat}_y \{xy - f^*(y)\} \quad (2.98)$$

permet d'explorer tout le graphe, car cette transformation est involutive quelle que soit la convexité de f , au prix d'une formulation mathématique plus complexe ($f^*(y)$ n'est plus, en général, une fonction car plusieurs images peuvent être associées à y). La formulation variationnelle [164, 151] obtenue à partir de ces relations prend la forme (2.99)

$$\tilde{w}(\dot{\underline{\underline{E}}}) = \text{Stat}_{\mathbb{L}_0^{(s)}, \hat{\underline{\underline{\varepsilon}}}^{(s)}} \left\{ \tilde{w}_T(\dot{\underline{\underline{E}}}, \mathbb{L}_0^{(s)}, \hat{\underline{\underline{\varepsilon}}}^{(s)}) + \sum_r c^r V^{(r)}(\mathbb{L}_0^{(r)}, \hat{\underline{\underline{\varepsilon}}}^{(r)}) \right\} \quad (2.99)$$

avec

$$V^{(r)}(\mathbb{L}_0^{(r)}, \hat{\underline{\underline{\varepsilon}}}^{(r)}) = \text{Stat}_{\hat{\underline{\underline{\varepsilon}}}}^{(r)} \left[w^{(r)}(\hat{\underline{\underline{\varepsilon}}}^{(r)}) - w_T^{(r)}(\hat{\underline{\underline{\varepsilon}}}^{(r)}) \right] \quad (2.100)$$

Elle ne permet plus d'obtenir de bornes, mais guide toujours l'utilisateur vers le choix d'une linéarisation optimale. La difficulté qui apparaît à ce niveau est que l'on ne sait pas, pour le moment, optimiser la fonctionnelle (2.99) par rapport à la fois à des champs constants par morceaux $\hat{\underline{\underline{\varepsilon}}}^{(r)}$ et $\mathbb{L}_0^{(r)}$. Une première

²⁶Pour une fonction dérivable l'opérateur stationnaire est tel que : $\text{Stat}_x \{\bullet\} \Leftrightarrow \frac{\partial \bullet}{\partial x} = 0$, dans un cadre plus général cette relation peut être comprise, tout comme la transformée de Legendre-Fenchel, au sens des sous-différentiels.

variante privilégiant l'optimisation vis-à-vis de $\hat{\underline{\underline{\varepsilon}}}^{(r)}$ et l'utilisation des modules tangents $\partial^2 w^{(r)} / \partial \underline{\underline{\varepsilon}} \partial \underline{\underline{\varepsilon}}$ a tout d'abord été considérée, cette formulation est communément désignée aujourd'hui sous le terme de second ordre tangent (SOT). Des résultats encourageants fournissant des estimations proches de simulations en champs complets [132] ont été obtenus par [162]. Une implémentation de cette méthode pour les polycristaux a été réalisée par [25, 24]. Mais, dans le cadre de situations proches de la percolation [110], cet estimateur peut ne pas respecter la borne variationnelle précédente. Cette limitation pourrait être due, d'après les auteurs, à la non prise en compte des seconds moments des champs dans cette première formulation au second ordre, alors que l'on a vu que la formulation variationnelle (§2.2.2.e) intégrait ce type d'information. Cette constatation a conduit à une reformulation de la méthode au second ordre [151, 158] permettant à la fois d'intégrer une information sur la fluctuation des champs et restant exacte au second ordre, cette variante sera notée simplement SO dans la suite. Ce nouvel estimateur consiste à essayer d'optimiser $\mathbb{L}_0^{(r)}$ dans la formulation variationnelle stationnaire. Une implémentation de cette méthode a été réalisée dans le cadre polycristallin, indépendamment par Liu [119, 118, 102, 117] et Lebensohn. Cette méthode semble fournir de bons résultats par rapport aux simulations en champs complets par FFT [102] ou à l'aide d'éléments finis spéciaux (HEP) [117]. De plus, cet estimateur n'a encore jamais été mis en défaut par comparaison à la borne variationnelle.

Bien que cette dernière formulation au second ordre semble donner de bons résultats, nous avons choisi, dans ce travail, d'utiliser la formulation variationnelle de Ponte Castañeda. Ce sera cette formulation qui sera visée dans la suite lorsque nous évoquerons "la formulation variationnelle". Celle-ci nous a semblé présenter un bon compromis entre simplicité et précision et sa forme est aujourd'hui figée, ce qui n'est pas tout à fait vrai pour les formulations au second ordre. De plus, ce choix nous a permis de profiter de l'implémentation de la formulation variationnelle polycristalline développée par Gilormini [66]. Il est également à noter que le lien entre les champs apparaissant dans le milieu linéaire de comparaison et ceux réellement associés au milieu non linéaire est plus simple dans le cas de la formulation variationnelle que dans le cas des modèles au second ordre [86].

2.2.2.g Informations sur les champs mécaniques

Le choix de la formulation variationnelle étant fait, nous disposons d'une méthode de détermination du potentiel effectif du matériau. Il est maintenant nécessaire de s'intéresser à la démarche permettant d'obtenir des informations sur les champs mécaniques à partir de ce potentiel.

La première variation du potentiel effectif, nous donne le comportement effectif instantané du matériau.

$$\delta \tilde{w}(\underline{\underline{\dot{E}}}) = \tilde{w}(\underline{\underline{\dot{E}}} + \delta \underline{\underline{\dot{E}}}) - \tilde{w}(\underline{\underline{\dot{E}}}) = \left\langle \frac{\partial w}{\partial \underline{\underline{\dot{E}}}} : \delta \underline{\underline{\dot{E}}} \right\rangle = \underline{\underline{\Sigma}} : \delta \underline{\underline{\dot{E}}} \quad (2.101)$$

Cette relation est obtenue en utilisant le lemme de Hill sur les champs solutions $\underline{\underline{\dot{E}}}$ du problème de minimisation en taux de déformation imposé²⁷.

Dans le cadre de la formulation variationnelle présentée précédemment, la stationnarité vis-à-vis de μ conduit à :

$$\frac{\partial \tilde{w}}{\partial \underline{\underline{\dot{E}}}} = \frac{\partial}{\partial \underline{\underline{\dot{E}}}} \left[\inf_{\mu \geq 0} \{ \tilde{w}_0 - \langle f_\star(\mu) \rangle \} \right] = \frac{\partial \tilde{w}_0}{\partial \underline{\underline{\dot{E}}}} \quad (2.102)$$

Ainsi, la contrainte macroscopique prévue en considérant le potentiel du composite linéaire de comparaison coïncide avec celle liée au potentiel non linéaire. Cette remarque a été faite initialement par [42].

Pour obtenir des informations statistiques plus fines sur les champs apparaissant dans le matériau, on peut avoir recours à la dérivation du potentiel effectif vis-à-vis d'un paramètre à déformation macroscopique figée. En effet, en considérant $w_t(\underline{\underline{\dot{E}}}) = w(\underline{\underline{\dot{E}}}, t)$ et en posant $\underline{\underline{\dot{E}}}_t$ la solution du problème (2.103).

$$\tilde{w}_t(\underline{\underline{\dot{E}}}) = \min_{\underline{\underline{\dot{E}}}^\star \in \mathcal{C}^m(\underline{\underline{\dot{E}}})} \langle w_t(\underline{\underline{\dot{E}}}^\star) \rangle \quad (2.103)$$

²⁷On remarque que la fluctuation de champ solution est cinématiquement admissible à la fluctuation macroscopique et que l'admissibilité statique de la contrainte est assurée par l'équation d'Euler-Lagrange, $\underline{\underline{\nabla}} \cdot (\partial w / \partial \underline{\underline{\dot{E}}}) = 0$, associée à la première égalité de (2.39a).

Cette expression se développe en :

$$\frac{d\tilde{w}_t}{dt}(\underline{\dot{E}}) = \left\langle \frac{\partial w_t}{\partial t} + \frac{\partial w_t}{\partial \underline{\dot{E}}} : \frac{\partial \underline{\dot{E}}}{\partial t} \right\rangle = \left\langle \frac{\partial w_t}{\partial t} \right\rangle + \left\langle \frac{\partial w_t}{\partial \underline{\dot{E}}} : \frac{\partial \underline{\dot{E}}}{\partial t} \right\rangle \quad (2.104)$$

Or, ce deuxième terme est nul du fait du lemme de Hill en utilisant :

$$\frac{\partial w_t}{\partial \underline{\dot{E}}} \in \mathcal{S}^m \quad \text{et} \quad \frac{\partial \underline{\dot{E}}}{\partial t} \in \mathcal{C}^m(0) \quad (2.105)$$

du fait de l'équation d'Euler-lagrange et de l'admissibilité cinématique de $\underline{\dot{E}}_t$ vis-à-vis de $\underline{\dot{E}}$ (indépendant de t). On a donc la relation générale :

$$\frac{\partial \tilde{w}_t}{\partial t} = \left\langle \frac{\partial w_t}{\partial t} \right\rangle_{\underline{\dot{E}}_t} \quad (2.106)$$

Dans le cadre de la méthode variationnelle, pour des modules homogènes par morceau, on peut écrire :

$$w_{\underline{\tau}^{(r)}}(\underline{x}, \underline{\dot{E}}) = w(\underline{x}, \underline{\dot{E}}) + \chi^{(r)}(\underline{x}) \underline{\tau}^{(r)} : \underline{\dot{E}} \quad (2.107a)$$

$$= \inf_{\mu^{(s)} \geq 0} \left\{ w_0(\mu^{(s)}, \underline{\dot{E}}) - f_\star(\mu^{(s)}) \right\} + \chi^{(r)}(\underline{x}) \underline{\tau}^{(r)} : \underline{\dot{E}} \quad (2.107b)$$

$$= \inf_{\mu^{(s)} \geq 0} \left\{ w_{0, \underline{\tau}^{(r)}}(\mu^{(s)}, \underline{\dot{E}}) - f_\star(\mu^{(s)}) \right\} \quad (2.107c)$$

avec

$$w_{0, \underline{\tau}^{(r)}}(\mu^{(s)}, \underline{\dot{E}}) = w_0(\mu^{(s)}, \underline{\dot{E}}) + \chi^{(r)}(\underline{x}) \underline{\tau}^{(r)} : \underline{\dot{E}}$$

Ce qui conduit à l'expression du potentiel effectif :

$$\tilde{w}_{\underline{\tau}^{(r)}}(\underline{\dot{E}}) = \inf_{\mu^{(s)} \geq 0} \left\{ \tilde{w}_{0, \underline{\tau}^{(r)}}(\mu^{(s)}, \underline{\dot{E}}) - \langle f_\star(\mu^{(s)}) \rangle \right\} \quad (2.108)$$

avec

$$\tilde{w}_{0, \underline{\tau}^{(r)}}(\mu^{(s)}, \underline{\dot{E}}) = \min_{\underline{\dot{E}} \in \mathcal{C}^m(\underline{\dot{E}})} \left\langle w_0(\mu^{(s)}, \underline{\dot{E}}) + \chi^{(r)}(\underline{x}) \underline{\tau}^{(r)} : \underline{\dot{E}} \right\rangle \quad (2.109)$$

En utilisant la stationnarité de la formulation variationnelle par rapport à μ et la relation (2.106), on arrive à l'expression :

$$\frac{\partial \tilde{w}_{\underline{\tau}^{(r)}}}{\partial \underline{\tau}^{(r)}} = \frac{\partial \tilde{w}_{0, \underline{\tau}^{(r)}}}{\partial \underline{\tau}^{(r)}} = c^r \underline{\dot{E}}_{\underline{\tau}^{(r)}} \quad (2.110)$$

vraie quel que soit $\underline{\tau}^{(r)}$ et conduisant donc au résultat recherché pour $\underline{\tau}^{(r)} = 0$. Le champ de contrainte moyen par phase peut être lié, de même, au potentiel linéaire de comparaison. On appliquera donc les formules de localisations classiques du milieu linéaire pour estimer ce terme.

En posant

$$w_{\lambda^{(r)}}(\underline{x}, \underline{\dot{E}}) = w(\underline{x}, \underline{\dot{E}}) + \frac{1}{2} \chi^{(r)}(\underline{x}) \lambda^{(r)} :: (\underline{\dot{E}} \otimes \underline{\dot{E}}) \quad (2.111)$$

on montre également :

$$\frac{\partial \tilde{w}_{\lambda^{(r)}}}{\partial \lambda^{(r)}} \Big|_{\lambda^{(r)}=0} = \frac{\partial \tilde{w}_{\lambda^{(r)}}^0}{\partial \lambda^{(r)}} \Big|_{\lambda^{(r)}=0} = \frac{c^r}{2} \langle \underline{\dot{E}} \otimes \underline{\dot{E}} \rangle_r \quad (2.112)$$

Idiart et Ponte Castañeda [84, 86, 87] généralisent ces relations pour des moments plus élevés et pour les procédures de linéarisation au second ordre. Le résultat à retenir est que l'on peut utiliser le composite linéaire issu du modèle variationnel pour estimer les moyennes et les seconds moments des champs de taux de déformation et de contrainte. Or, dans le cas d'un potentiel linéaire $w_0(\underline{x}, \underline{\dot{E}}) = 1/2 (\sum_r \chi^{(r)}(\underline{x}) \mathbb{L}^{(r)}) :: (\underline{\dot{E}} \otimes \underline{\dot{E}})$ ces grandeurs s'estiment simplement à partir des relations :

$$\underline{\dot{E}}^{(r)} = \mathbb{A}^{(r)} : \underline{\dot{E}} \quad (2.113a)$$

$$\frac{\partial \tilde{w}_0}{\partial \mathbb{C}^{(r)}} = \frac{c^r}{2} \langle \underline{\dot{E}} \otimes \underline{\dot{E}} \rangle_r \quad (2.113b)$$

$$\underline{\sigma}^{(r)} = \mathbb{L}^{(r)} : \underline{\dot{E}}^{(r)} \quad (2.113c)$$

$$\langle \underline{\sigma} \otimes \underline{\sigma} \rangle_r = \mathbb{L}^{(r)} : \langle \underline{\dot{E}} \otimes \underline{\dot{E}} \rangle_r : \mathbb{L}^{(r)} \quad (2.113d)$$

Conclusion

Ce chapitre nous a permis de nous familiariser avec les techniques d'homogénéisations qui seront utilisées dans la suite de ce document. Nous avons pu remarquer que ces formulations étaient avant tout basées sur une description statistique du matériau. Les principaux modèles sur lesquels repose cette méthode sont définis pour des comportements linéaires. Ainsi, les techniques d'homogénéisation non linéaires nécessitent l'utilisation d'une méthode de linéarisation. Dans ce chapitre, plusieurs de ces linéarisations ont été introduites dans le cadre de la prévision du comportement instantané des polycristaux viscoplastiques, elles nous seront utiles par la suite, mais c'est la formulation variationnelle de Ponte Castañeda qui jouera réellement un rôle central dans notre étude.

Chapitre 3

Modélisation variationnelle de l'écoulement d'un polycristal multiphasé

Sommaire

3.1	Description morphologique d'un polycristal biphasé	68
3.1.1	Méthode de redéfinition des phases	68
3.1.2	Autre description de la microstructure biphasée	69
3.1.2.a	Macro-homogénéité et formulation variationnelle à deux transitions d'échelles	71
3.1.2.b	Remarques et hypothèses	72
3.1.3	Choix de la méthode d'homogénéisation linéaire	72
3.2	Formulation instantanée	73
3.2.1	Linéarisation du monocristal	73
3.2.1.a	Formulation scalaire de deBotton et Ponte Castañeda	74
3.2.1.b	Formulation tensorielle de Ponte Castañeda et Suquet	75
3.2.2	Homogénéisation du polycristal	77
3.2.2.a	Forme à une transition d'échelle	77
3.2.2.b	Forme à deux transitions d'échelle	78
3.3	Détails liés au comportement en loi puissance	81
3.3.1	Calcul de $v_{(k)}^{(r)}$	81
3.3.2	Simplification pour des $n_{(k)}^{(r)}$ identiques	81
3.4	Méthode de minimisation de la fonctionnelle	82
3.4.1	Calcul du gradient de la fonctionnelle à minimiser	84
3.4.2	Méthode de calcul des seconds moments	86
3.4.2.a	Modèle à une transition d'échelle	87
3.4.2.b	Modèles à deux transitions d'échelle	88
3.5	Evolution microstructurale	89
3.5.1	Texture cristallographique	89
3.5.2	Texture morphologique	91
3.5.2.a	Evolution homogène dans le cas à une transition d'échelle	91
3.5.2.b	Prolongement dans le cas à deux transitions d'échelle	92

Introduction

La bibliographie du chapitre 1 montre que l'influence de la distribution des phases sur le comportement mécanique des polycristaux viscoplastiques biphasés n'est pas une question simple. Nous cherchons donc à améliorer la compréhension de cette dépendance à travers la construction d'un modèle spécifique.

Pour ce faire, nous allons nous baser sur la formulation variationnelle présentée au chapitre 2, et rechercher un modèle d'homogénéisation linéaire permettant de considérer la répartition des phases comme un paramètre, dans le but de tester son effet. Usuellement, les modèles d'homogénéisation considèrent l'existence d'une seule source d'hétérogénéité. Dans notre cas, la situation est plus délicate car il nous faut concilier les hétérogénéités liées à la nature cristalline du matériau et celles liées à la présence de plusieurs phases. La première section de ce chapitre propose une simplification du problème permettant de représenter ces deux aspects.

Le détail de la méthode permettant d'obtenir la réponse mécanique instantanée du matériau sous ces hypothèses, dans un cadre variationnel, est ensuite exposé. Certains points de l'implémentation, relatifs aux lois puissances ou à la procédure de minimisation utilisée, sont ensuite détaillés.

Enfin, comme la mise en forme du matériau biphasé implique des transformations finies, nous verrons, dans une dernière section, comment intégrer l'évolution microstructurale dans le cadre eulérien adopté ici (§2.2.1).

3.1 Description morphologique d'un polycristal biphasé

La microstructure d'un polycristal biphasé est plus complexe que celle intervenant dans le cas d'un polycristal monophasé. La difficulté supplémentaire qui apparaît est liée au fait qu'il faut non seulement décrire les différentes orientations cristallographiques mais aussi la répartition des différentes phases (variétés allotropiques) présentes dans le matériau. Dans le cas d'un polycristal réel, ces deux descriptions coexistent à la même échelle et conduisent à une représentation complexe de la microstructure. Aucune méthode d'homogénéisation, à notre connaissance, n'existe actuellement pour traiter ce type de problème dans un cadre général où ces deux sources d'hétérogénéité présentent des distributions distinctes ; il nous faut donc avoir recours à une simplification. Les auteurs ayant abordé cette question se sont ramenés à un cas polyphasé classique en définissant une notion de phase généralisée fusionnant les deux types d'hétérogénéités. Cette approche a ses limites et ne suffit pas, dans le cas présent, pour étudier l'influence de la répartition des phases. Nous proposerons donc une alternative à cette description.

3.1.1 Méthode de redéfinition des phases

Pour prolonger les notions de fonctions de corrélation déjà évoquées à la section 2.1.1.c, nous allons considérer un polycristal biphasé de phases φ_1 et φ_2 . Ces phases cristallographiques sont considérées comparables en termes d'orientations ; ce sont par exemple deux mailles cubiques comme dans le cas auténo-ferritique qui nous intéresse. A tout point \underline{x} d'un VER polycristallin Ω sont associées deux propriétés physiques, l'orientation du monocristal notée g_i , $i \in \llbracket 1; N \rrbracket$, associée aux domaines Ω_{g_i} et la phase cristallographique notée φ_I , $I \in \llbracket 1; 2 \rrbracket$, associée aux domaines Ω_{φ_I} . On notera pour la suite que :

$$\forall \underline{x} \in \Omega, \exists ! (I, j) \in \llbracket 1; 2 \rrbracket \times \llbracket 1; N \rrbracket \quad | \quad \underline{x} \in \Omega_{\varphi_I} \cap \Omega_{g_j} \quad \text{ou encore} \quad \underline{x} \in \Omega_{\varphi_I \cap g_j} \quad (3.1)$$

L'information morphologique à un et deux points la plus générale pour décrire un polycristal biphasé peut prendre la forme (3.2).

$$\forall (I, i) \in \llbracket 1; 2 \rrbracket \times \llbracket 1; N \rrbracket, \quad c^{\varphi_I g_i} = \langle \chi^{\varphi_I}(\underline{x}) \chi^{g_i}(\underline{x}) \rangle = \frac{|\Omega_{\varphi_I \cap g_i}|}{|\Omega|} \quad (3.2a)$$

$$\forall (I, J, i, j) \in \llbracket 1; 2 \rrbracket^2 \times \llbracket 1; N \rrbracket^2, \forall \underline{h}, \quad C^{\varphi_I g_i \varphi_J g_j}(\underline{h}) = \langle \chi^{\varphi_I}(\underline{x}) \chi^{g_i}(\underline{x}) \chi^{\varphi_J}(\underline{x} + \underline{h}) \chi^{g_j}(\underline{x} + \underline{h}) \rangle \quad (3.2b)$$

Mais cette description ne permet pas d'utiliser les méthodes d'homogénéisation classiques reposant sur la description d'une seule propriété en tout point du matériau et non sur celle de plusieurs propriétés comme dans le cas présent. Nous allons donc chercher à nous ramener à une situation connue.

Certains auteurs [9, 49, 50] ayant abordé ce type de problème, ont pris le parti de considérer que ce matériau n'était en fait qu'un composite, dans lequel les phases généralisées Φ_i sont définies à partir de la donnée d'une orientation et d'une phase cristallographique. Cette méthode, qui sera dite de redéfinition

des phases, utilise donc toute l'information fournie par (3.2) pour formuler un problème équivalent. Les fonctions de corrélation à un et deux points se définissent ainsi comme dans le cas d'un matériau hétérogène à n phases :

$$\forall i \in \llbracket 1; n \rrbracket, \quad c^{\Phi_i} = \langle \chi^{\Phi_i}(\underline{x}) \rangle = \frac{|\Omega_{\Phi_i}|}{|\Omega|} \quad (3.3a)$$

$$\forall (i, j) \in \llbracket 1; n \rrbracket^2, \forall \underline{h}, \quad C^{\Phi_i \Phi_j}(\underline{h}) = \langle \chi^{\Phi_i}(\underline{x}) \chi^{\Phi_j}(\underline{x} + \underline{h}) \rangle \quad (3.3b)$$

Cette description simple et contenant, a priori, toute l'information à deux points, n'est pas entièrement satisfaisante car elle ne permet pas de distinguer des phases généralisées différentes, du fait d'orientations cristallographiques différentes ou du fait de phases cristallographiques différentes. De plus, l'information microstructurale présentée ici doit être utilisée dans le cadre d'un modèle d'homogénéisation, tels ceux présentés au chapitre 2. Or l'absence de distinction entre les deux sources d'hétérogénéité impose que celles-ci "suivent le même type de modèle". Il n'est en effet pas envisageable de représenter, à l'aide de cette formulation, un assemblage proche d'un modèle matrice-inclusion pour les phases cristallographiques et un modèle auto-cohérent pour les orientations. Ce type de formulation est ainsi classiquement utilisé avec un modèle auto-cohérent, ce qui impose aux grains et aux phases d'être fortement désordonnés et, en particulier, qu'aucune phase ne soit en matrice. Nous voyons donc clairement, à travers cet exemple, qu'il n'est pas possible de faire jouer un rôle particulier à l'une des phases cristallographiques, tout en conservant le modèle auto-cohérent, bien adapté à la description de la distribution des orientations cristallines. Cette description ne nous permet donc pas d'atteindre notre objectif qui vise à faire varier la distribution des phases, tout en gardant une description crédible pour l'agencement cristallin.

Une autre limitation peut être notée. La formulation par redéfinition des phases ne permet, pour les modèles d'homogénéisation présentés au chapitre 2, de décrire la microstructure qu'au travers d'une seule fonction de corrélation à deux points et donc, sous l'hypothèse de distribution ellipsoïdale (2.28), qu'au travers d'un seul tenseur microstructural $\underline{\underline{Z}}$. Ceci signifie que l'on ne pourra pas modéliser d'évolutions différentes pour les symétries des fonctions de corrélation relatives aux orientations et pour les fonctions de corrélation relatives aux phases. De plus, l'hypothèse que indépendamment les fonctions de corrélation relatives à chaque type d'hétérogénéité vérifient cette symétrie n'assure pas que les phases généralisées la vérifient. En fait, ce n'est vrai que si les deux symétries ellipsoïdales sont identiques. De façon simplifiée¹, nous considérerons donc souvent que les différentes sources d'hétérogénéité présentent des distributions de symétrie identiques, au sens de (2.28) et que c'est donc cette symétrie commune qui définira celle de la répartition des phases généralisées.

Pour dépasser quelques unes de ces limitations, il faudrait pouvoir décrire de façon plus indépendante la répartition des familles d'orientations cristallographiques et celle des variétés allotropiques. Dans la suite, toute grandeur se rapportant à une phase généralisée Φ_k sera désignée de façon plus précise par $\varphi_I \cap g_j$.

3.1.2 Autre description de la microstructure biphasée

Afin de pouvoir traiter le problème, nous cherchons à ne caractériser qu'un seul type d'hétérogénéité à la fois dans le matériau, mais nous voudrions néanmoins conserver une description spécifique pour l'hétérogénéité liée aux orientations et celle liée à la répartition des phases. Dans ce contexte, on peut imaginer que l'une ou l'autre de ces hétérogénéités prédomine suivant l'échelle à laquelle nous décrivons le matériau.

Si nous considérons, par exemple, un polycristal contenant des domaines de phase d'extension importante devant la taille de grain, on conçoit intuitivement qu'à l'échelle du matériau l'agencement des phases soit important, alors que le détail de l'arrangement des orientations l'est moins du fait d'une possible "perte de corrélation" à cette échelle. A l'échelle d'un domaine de phase, par contre, l'agencement des orientations va devenir significatif.

Dans ce cadre, la fonction de corrélation à un point, définie à l'échelle du matériau, ne prendra pas la cristallographie en compte mais décrira la fraction volumique de chaque phase dans le polycristal. L'information à deux points quant à elle représentera statistiquement la répartition des domaines de phases dans le polycristal. Ces fonctions se définissent de façon naturelle à partir des expressions suivantes :

¹En effet, le tenseur $\underline{\underline{Z}}$ décrit uniquement la symétrie des fonctions de corrélation des phases généralisées qui est supposée ellipsoïdale et identique pour toutes et ne décrit pas directement la distribution des orientations ou des phases.

$$\forall I \in \llbracket 1; 2 \rrbracket, \quad c^{\varphi_I} = \langle \chi^{\varphi_I}(\underline{x}) \rangle = \frac{\sum_J |\Omega_{\varphi_I \cap g_J}|}{|\Omega|} \quad (3.4a)$$

$$\forall (I, J) \in \llbracket 1; 2 \rrbracket^2, \forall \underline{h}, \quad C^{\varphi_I \varphi_J}(\underline{h}) = \langle \chi^{\varphi_I}(\underline{x}) \chi^{\varphi_J}(\underline{x} + \underline{h}) \rangle \quad (3.4b)$$

À une échelle plus fine, chacune des phases est composée d'un grand nombre de monocristaux, on définit ainsi les fonctions conditionnelles (3.5).

$$\forall (i, J) \in \llbracket 1; N \rrbracket \times \llbracket 1; 2 \rrbracket, \quad c_{|\varphi_J}^{g_i} = \langle \chi^{g_i}(\underline{x}) \rangle_{\varphi_J} = \frac{|\Omega_{\varphi_J \cap g_i}|}{|\Omega_{\varphi_J}|} \quad (3.5a)$$

$$\forall (i, j, K) \in \llbracket 1; N \rrbracket^2 \times \llbracket 1; 2 \rrbracket, \forall \underline{h}, \quad C_{|\varphi_K}^{g_i g_j}(\underline{h}) = \langle \chi^{g_i}(\underline{x}) \chi^{g_j}(\underline{x} + \underline{h}) \rangle_{\varphi_K} \quad (3.5b)$$

où la fonction $C_{|\varphi_K}^{g_i g_j}$ décrit la probabilité de trouver un grain d'orientation g_j partant d'un point d'orientation g_i sachant que le point de départ fait partie de la phase² φ_K .

Afin de clarifier les hypothèses liées à cette description, nous allons expliciter le passage d'une description basée sur (3.2) à une représentation utilisant (3.4) et (3.5). Concernant l'information à un point, on peut toujours écrire (3.2a) sous la forme :

$$\forall (I, i) \in \llbracket 1; 2 \rrbracket \times \llbracket 1; N \rrbracket \quad c^{\varphi_I g_i} = c^{\varphi_I} c_{|\varphi_I}^{g_i} \quad (3.6)$$

qui fait bien intervenir les quantités introduites précédemment.

Pour l'information à deux points, lorsque $\|\underline{h}\|$ est plus grande que la distance de décorrélation des orientations³ L^g , on obtient :

$$\forall (I, J, i, j) \in \llbracket 1; 2 \rrbracket^2 \times \llbracket 1; N \rrbracket^2, \forall \underline{h} \mid \|\underline{h}\| > L^g, \quad C^{\varphi_I g_i \varphi_J g_j}(\underline{h}) = C^{\varphi_I \varphi_J}(\underline{h}) c_{|\varphi_I}^{g_i} c_{|\varphi_J}^{g_j} \quad (3.7)$$

Pour $\|\underline{h}\|$ inférieure à L^g , nous supposons que \underline{h} joint très rarement des points appartenant à des phases différentes⁴. Ainsi, nous considérerons $C^{\varphi_I g_i \varphi_J g_j}$ négligeable si $I \neq J$ et nous lierons $C^{\varphi_I g_i \varphi_I g_j}$ à $C_{|\varphi_I}^{g_i g_j}$ en considérant la relation générale (3.8)

$$\begin{aligned} \forall \underline{h} \mid \|\underline{h}\| < L^g, \quad C^{\varphi_I g_i \varphi_I g_j}(\underline{h}) &= \frac{1}{|\Omega|} \left[\int_{\Omega_{\varphi_I}} \chi^{g_i}(\underline{x}) \chi^{g_j}(\underline{x} + \underline{h}) dV_{\underline{x}} \right. \\ &\quad \left. - \sum_{J, J \neq I} \int_{\Omega_{\varphi_I}} \chi^{g_i}(\underline{x}) \chi^{g_j}(\underline{x} + \underline{h}) \chi^{\varphi_J}(\underline{x} + \underline{h}) dV_{\underline{x}} \right] \end{aligned} \quad (3.8a)$$

$$= c^{\varphi_I} C_{|\varphi_I}^{g_i g_j}(\underline{h}) - \sum_{J, J \neq I} c^{\varphi_I} C^{\varphi_I g_i \varphi_J g_j}(\underline{h}) \quad (3.8b)$$

Nous obtenons donc l'expression simplifiée suivante ne faisant intervenir que les quantités introduites précédemment :

$$C^{\varphi_I g_i \varphi_I g_j}(\underline{h}) \approx \delta_{IJ} c^{\varphi_I} C_{|\varphi_I}^{g_i g_j}(\underline{h}) \quad (3.9)$$

Cette hypothèse revient à supposer que les domaines de phase sont bien plus grands que les domaines de corrélation des orientations.

Nous pouvons passer continûment de l'une de ces relations à l'autre lorsque \underline{h} varie à condition d'être dans la situation séparée décrite sur le schéma 3.1. Pour pouvoir traiter cette situation par homogénéisation, il faut de plus supposer qu'un EMR, et même un VER existe pour les orientations, à une échelle notablement plus grande que L^g et notablement plus faible que l^φ et pour les phases à une échelle bien plus grande que L^φ . Nous nous placerons dans ce cadre pour toute la suite du travail.

On notera qu'une formulation duale, où les domaines d'orientation seraient bien plus grands que les domaines de phase est possible et que, bien que peu crédible dans le cas des aciers auténo-ferritiques considérés ici, cette description pourrait caractériser d'autres types de microstructures telles que celle présentée en figure 3.2. C'est la description considérant les domaines de phase bien plus grands que les grains qui sera visée, dans la suite, lorsque nous ferons référence à un modèle à deux transitions d'échelles.

²Nous pourrions de plus considérer, dans un cadre plus général, une dépendance de ces fonctions de corrélation en fonction de la position du domaine de phase considéré.

³Distance pour laquelle, $\forall \|\underline{h}\| > L^g, \langle \chi^{g_i}(\underline{x}) \chi^{g_j}(\underline{x} + \underline{h}) \rangle = \langle \chi^{g_i}(\underline{x}) \rangle \langle \chi^{g_j}(\underline{x}) \rangle$.

⁴Ce qui revient à considérer $\forall I, \forall \underline{h} \mid \|\underline{h}\| < L^g, \|\underline{h}\| |\partial \Omega_{\varphi_I}| \ll |\Omega_{\varphi_I}|$.

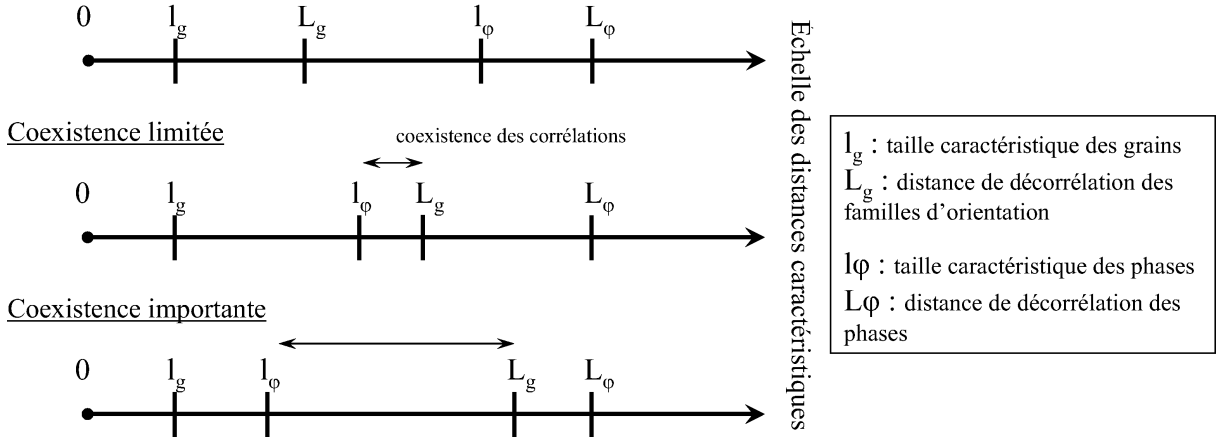
Configuration séparée

FIG. 3.1: Différentes configurations pour la description de phases composées de familles d'orientations.

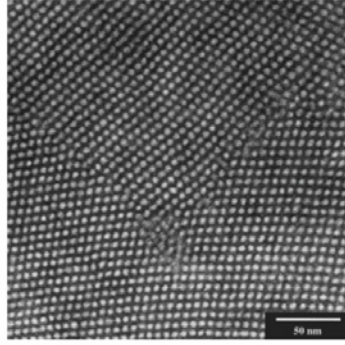


FIG. 3.2: Microstructure d'un copolymère bloc, matrice composée de polyisoprène et d'huile minérale et réseau cubique centré de sphères de polystyrène [165]. Les domaines présentant une orientation donnée semblent bien plus grands que la structure biphasée.

3.1.2.a Macro-homogénéité et formulation variationnelle à deux transitions d'échelles

Pour que les descriptions précédentes puissent être utiles du point de vue mécanique, il faut introduire une notion de macro-homogénéité à deux transitions d'échelle. En supposant l'existence des VER introduits au paragraphe précédent, les conditions de macro-homogénéité associées traduisent que, pour une échelle intermédiaire entre l'échelle des orientations et l'échelle des phases, la réponse mécanique de ces éléments est indépendante du détail des conditions de bords qui leur sont appliquées. De même, à une échelle bien plus importante que l'échelle des phases, nous supposons qu'une telle condition est également vérifiée.

Cette macro-homogénéité à deux transitions d'échelles permet d'étendre les principes de minimum présentés en (2.39) dans le cas où deux séparations d'échelles existent⁵. En effet, considérons par exemple le principe de minimum de l'énergie complémentaire pour un VER Ω soumis à la contrainte macroscopique $\underline{\underline{\Sigma}}$, sa forme macro-homogène à l'échelle des défauts de taille caractéristique l est donnée directement par (3.10).

$$\tilde{\tilde{u}}(\underline{\underline{\Sigma}}) = \min_{\underline{\underline{\sigma}}(\underline{x}) \in \mathcal{S}^m(\underline{\underline{\Sigma}})} \langle u(\underline{x}, \underline{\underline{\sigma}}(\underline{x})) \rangle_{\Omega_{\underline{x}}} \quad (3.10)$$

Si l'on écrit le principe de minimum pour un composite macro-homogène par rapport à des défauts de taille L puis le fait que ces VER sont eux-mêmes constitués de domaines macro-homogènes par rapport

⁵La notation simple tilde sera réservée au comportement effectif des phases, alors que les doubles tildes décriront celui du matériau dans le contexte des polycristaux biphasés.

aux hétérogénéités de taille l , on obtient successivement (3.11a) et (3.11b).

$$\tilde{u}(\underline{\Sigma}) = \underset{\underline{\Sigma}(\underline{X}) \in \mathcal{S}^m(\underline{\Sigma})}{\text{Min}} \langle \tilde{u}(\underline{X}, \underline{\Sigma}(\underline{X})) \rangle_{\Omega_{\underline{X}}} \quad (3.11a)$$

$$\tilde{u}(\underline{\Sigma}) = \underset{\underline{\Sigma}(\underline{X}) \in \mathcal{S}^m(\underline{\Sigma})}{\text{Min}} \left\langle \underset{\underline{\sigma}(\underline{x}) \in \mathcal{S}^m(\underline{\Sigma}(\underline{X}))}{\text{Min}} \langle u(\underline{x}, \underline{\sigma}(\underline{x})) \rangle_{(\omega(\underline{X}))_{\underline{x}}} \right\rangle_{\Omega_{\underline{X}}} \quad (3.11b)$$

Dans ces écritures, le domaine polycristallin Ω est parcouru avec deux échelles de raffinement, une échelle grossière, associée à la variable \underline{X} , et une échelle fine associée à la variable \underline{x} .

3.1.2.b Remarques et hypothèses

La formulation à deux transitions d'échelle qui vient d'être présentée propose une alternative intéressante permettant de conserver une description indépendante pour la répartition des familles d'orientations et pour celle des phases. Elle doit donc nous permettre, à représentation identique pour les familles d'orientations, de décrire différents agencements pour les phases.

De plus, l'hypothèse de séparation d'échelle permet d'utiliser des procédures d'homogénéisation indépendantes à l'échelle du matériau et au sein de chaque phase. Ces procédures pourront donc concilier des symétries différentes pour ces deux sources d'hétérogénéité. On définira dans le cadre de ce modèle à deux transitions d'échelle et, sous l'hypothèse de symétrie ellipsoïdale, un tenseur microstructural $\underline{\underline{Z}}_{|\varphi}^G$ par phase, lié à la répartition des familles d'orientations dans la phase φ_I et un tenseur microstructural $\underline{\underline{Z}}^\phi$ décrivant la symétrie de la fonction de corrélation, associée aux phases.

Avec les notations précédentes, ces hypothèses s'écrivent :

$$C^{\varphi\varphi'}(\underline{h}) = C^{\varphi\varphi'}(\|\underline{\underline{Z}}^\phi \cdot \underline{h}\|) \quad (3.12a)$$

$$C_{|\varphi}^{gg'}(\underline{h}) = C_{|\varphi}^{gg'}(\|\underline{\underline{Z}}_{|\varphi}^G \cdot \underline{h}\|) \quad (3.12b)$$

La section suivante va préciser les modèles d'homogénéisation linéaires qui vont être utilisés pour estimer l'influence de la distribution des phases sur la réponse mécanique du matériau.

3.1.3 Choix de la méthode d'homogénéisation linéaire

Nous disposons maintenant de plusieurs outils nous permettant de décrire la structure d'un polycristal biphasé.

Le modèle auto-cohérent étendu au cas biphasé, à l'aide de la méthode de redéfinition des phases, permet de décrire les situations où aucune phase ne joue de rôle privilégié. Cette configuration peut sans doute être assez crédible lorsque la fraction volumique des deux phases est quasiment identique et que leur agencement est suffisamment "désordonné". Les équations liées à ce modèle, dans un cadre linéaire sont identiques à celles données en §2.1.4.b, pour le cas particulier du modèle auto-cohérent.

Outre ce modèle classique, nous disposons maintenant d'une formulation à deux transitions d'échelles. Celle-ci nous permet de conserver le formalisme auto-cohérent bien adapté dans le cadre polycristallin (comme nous l'avons rappelé à la remarque 2 du §2.2.2.b) pour chaque domaine de phase et de considérer un modèle de matériau hétérogène différent pour l'agencement des phases. Comme nous souhaitons estimer l'influence de la répartition des phases, nous considérerons plutôt des distributions proches de celles utilisées pour les composites et se démarquant du modèle auto-cohérent. Afin de représenter des configurations extrêmes pour la distribution des phases, nous avons implémenté les modèles de type W/HS introduit en §2.1.4.b. Lorsque la phase molle sera prise pour référence le modèle sera noté W/HS-, il correspond au cas où le comportement sera essentiellement donné par la phase molle qui jouera le rôle de matrice, la phase dure n'intervenant que sous la forme d'un renfort. L'autre cas, c'est-à-dire celui où la phase dure, prise comme comportement de référence, joue le rôle de matrice est noté W/HS+. L'écart entre la réponse prévue par ces deux modèles va caractériser l'influence potentielle de la répartition des phases. L'écriture de ce modèle est réalisée en considérant les équations du modèle auto-cohérent à l'échelle des phases et l'homogénéisation des deux comportements ainsi obtenus, à travers une formulation de Hashin et Shtrikman où le comportement de référence sera celui de l'une des deux phases homogénéisées. On prendra garde lors du calcul des tenseurs d'influence \mathbb{C}^* de considérer le comportement de référence et le tenseur microstructural qui convient.

Toujours dans le cadre du modèle à deux transitions d'échelles, nous avons choisi, en outre, d'utiliser un modèle de Voigt et un modèle de Reuss à l'échelle de l'assemblage des phases afin de représenter des configurations extrêmes, où seules les fractions de phases sont connues, c'est-à-dire pour des cas où l'information à deux points d'appui n'est pas disponible. Ces modèles seront notés respectivement 2V et 2R ; les bornes de Voigt et Reuss obtenues à partir de la procédure de redéfinition des phases seront également traitées.

Notre hypothèse de séparation d'échelle est assez drastique et il est clair que peu de matériaux se rapportent à ce type de description mais, une fois encore, cette hypothèse n'a pour objectif que de nous fournir une tendance voire, si possible, un critère permettant de distinguer les situations où la répartition des phases doit être modélisée finement, de celles où cet effet n'aura une influence que du second ordre. Il aurait été intéressant de pouvoir relaxer notre hypothèse de séparation d'échelle, afin de prendre en compte des interactions plus complexes entre les orientations appartenant à des phases différentes et nous placer ainsi dans le cas où le domaine de coexistence décrit sur la figure 3.1 contribue de façon significative au comportement. Malheureusement, un tel modèle n'a pas pu être proposé pour le moment bien que plusieurs pistes aient été envisagées.

Nous noterons qu'un autre modèle d'homogénéisation, dit à deux sites, a également été utilisé dans la bibliographie [9, 101, 105, 97] pour modéliser les polycristaux biphasés. Ce type de description, inspirée de la formulation générale de [130], ne permet pas de représenter le cas où l'une des phases est en matrice, mais correspond plutôt à la répétition d'un motif figurant une corrélation microstructurale forte entre les deux phases. Cette description ne sera pas utilisée dans la suite, car si elle permet une généralisation de la description auto-cohérente, elle ne nous permet pas, de notre point de vue, d'obtenir une diversité microstructurale suffisante.

Les sections suivantes ont pour objectif de décrire précisément les hypothèses et l'implémentation du modèle utilisé pour la simulation du comportement mécanique de polycristaux biphasés. Nous allons tout d'abord présenter la méthode de linéarisation de Ponte Castañeda appliquée au cas polycristallin à la base du modèle. À partir de cet élément de base et de la description du milieu biphasé qui vient d'être donnée, la réponse instantanée du polycristal pourra être obtenue. Les expressions précises utilisées dans le cas d'une loi puissance seront ensuite développées, ainsi que la technique de minimisation au cœur de la résolution du problème. Après cette étude pour un état figé, nous passerons à la description de la mise à jour de la microstructure au cours de la sollicitation.

3.2 Formulation instantanée

Comme on l'a vu en §3.1, la description d'un polycristal biphasé peut être faite à une seule échelle, en définissant une phase par la combinaison d'une structure cristallographique et d'une orientation, ou à deux échelles en associant les variations d'orientations cristallines et de structures cristallographiques à deux échelles bien séparées. La combinaison de ces descriptions avec la méthode de linéarisation de Ponte Castañeda (brièvement introduite en §2.2.2.e) va nous permettre d'obtenir la réponse instantanée, c'est-à-dire sans évolution de microstructure, du polycristal.

3.2.1 Linéarisation du monocristal

La formulation variationnelle consiste, comme on l'a vu, en une linéarisation sécante optimisée. Ainsi, chaque famille d'orientations, sera représentée par un comportement linéarisé moyen, au sens proposé au §2.2.2.b, entièrement défini par la donnée d'un tenseur $\mathbb{M}^{(r)}$ (on rappelle qu'il n'y a pas de terme de précontrainte supplémentaire dans la formulation sécante contrairement à une formulation tangente ou affine par exemple). Pour l'instant, nous considérerons $\mathbb{M}^{(r)}$ comme un terme pouvant fluctuer à l'intérieur de la famille d'orientations, i.e. $\mathbb{M}^{(r)}(\underline{x})$; nous poserons l'homogénéité de ces termes dans les familles d'orientations, nécessaire au calcul, le plus tard possible.

Si l'on fait l'hypothèse, en suivant [43], que la cinématique de ce comportement linéarisé doit respecter, en tout point, la cinématique du monocristal telle qu'elle a été introduite en §2.2.1, alors la forme générale du comportement linéaire sécant est donnée par (2.69).

$$\underline{\underline{\dot{\epsilon}}}^{(r)}(\underline{x}) = \mathbb{M}^{(r)}(\underline{x}) : \underline{\underline{\sigma}}^{(r)}(\underline{x}) \quad \text{avec} \quad \mathbb{M}^{(r)}(\underline{x}) = \sum_k 2\alpha_{(k)}^{(r)}(\underline{x}) \underline{\underline{\mu}}_{(k)}^{(r)} \otimes \underline{\underline{\mu}}_{(k)}^{(r)} \quad (3.13)$$

où le champ $\alpha_{(k)}^{(r)}(\underline{x})$ est ajusté à l'aide de la procédure variationnelle. On peut faire le lien entre ces valeurs $\alpha_{(k)}^{(r)}$ et les taux de glissement $\dot{\gamma}_{(k)}^{(r)}$ en considérant les relations (2.61a) et (2.62) qui conduisent à :

$$\dot{\gamma}_{(k)}^{(r)}(\underline{x}) = 2\alpha_{(k)}^{(r)}(\underline{x})\tau_{(k)}^{(r)}(\underline{x}) \quad (3.14)$$

Cette hypothèse de respect de la cinématique permet à deBotton et Ponte Castañeda de se ramener à un problème scalaire, similaire à celui introduit dans le cadre des premières applications de la méthode variationnelle [152, 153].

3.2.1.a Formulation scalaire de deBotton et Ponte Castañeda

Pour obtenir la forme de la linéarisation dans ce cas, on se place à l'échelle des systèmes de glissement en considérant le potentiel de glissement $\Phi_{(k)}^{(r)}$ associé au système k de la famille d'orientations cristallines⁶ r . Ce potentiel est supposé dépendre uniquement de la cisssion résolue sur le système considéré⁷ $\Phi_{(k)}^{(r)}(\tau_{(k)}^{(r)})$. De plus, il est supposé de "carré convexe", c'est-à-dire :

$$\exists f : \mathbb{R}_+ \rightarrow \mathbb{R} \quad | \quad \forall \tau \in \mathbb{R}, \quad \Phi(\tau) = f(\tau^2) \quad \text{avec } f \text{ convexe} \quad (3.15)$$

Cette condition est vérifiée en particulier pour la loi puissance (2.71) qui nous intéressera dans le cadre de l'implémentation. Afin d'assurer la condition de convexité sur \mathbb{R} entier, on prolonge la définition de f :

$$\forall \nu < 0, \quad f(\nu) = +\infty \quad (3.16)$$

La fonction f étant convexe sur \mathbb{R} , la linéarisation s'obtient en tout point, tout comme en §2.2.2.e, par l'involution de la transformée de Legendre-Fenchel convexe⁸.

$$\left(f_{(k)}^{(r)}\right)^*(\alpha) = \sup_{\tau^2} \left\{ \alpha\tau^2 - f_{(k)}^{(r)}(\tau^2) \right\} = \sup_{\tau^2} \left\{ \alpha\tau^2 - \Phi_{(k)}^{(r)}(\tau) \right\} = v_{(k)}^{(r)}(\alpha) \quad (3.17a)$$

$$f_{(k)}^{(r)}(\tau^2) = \sup_{\alpha \geq 0} \left\{ \alpha\tau^2 - \left(f_{(k)}^{(r)}\right)^*(\alpha) \right\} = \sup_{\alpha \geq 0} \left\{ \alpha\tau^2 - v_{(k)}^{(r)}(\alpha) \right\} = \Phi_{(k)}^{(r)}(\tau) \quad (3.17b)$$

L'intérêt de cette transformation est de fournir une expression équivalente ne faisant intervenir explicitement τ que sous la forme d'un terme quadratique qui s'apparente à la densité d'énergie d'un matériau linéaire. Après cette linéarisation du comportement à l'échelle du système de glissement, une simple sommation sur tous les systèmes nous permet de passer à l'échelle du monocristal (§2.2.1) caractérisée par le potentiel $u^{(r)}$ en tout point.

$$u^{(r)}(\underline{\sigma}) = \sum_k \sup_{\alpha_{(k)}^{(r)} \geq 0} \left\{ \alpha_{(k)}^{(r)} \left(\tau_{(k)}^{(r)} \right)^2 - v_{(k)}^{(r)} \left(\alpha_{(k)}^{(r)} \right) \right\} \quad (3.18a)$$

$$u^{(r)}(\underline{\sigma}) = \sup_{\alpha_{(k)}^{(r)} \geq 0} \left\{ \sum_k \alpha_{(k)}^{(r)} \left(\tau_{(k)}^{(r)} \right)^2 - v^{(r)} \left(\left\{ \alpha_{(k)}^{(r)} \right\} \right) \right\} \quad (3.18b)$$

où $v^{(r)}\left(\left\{\alpha_{(k)}^{(r)}\right\}\right) = \sum_k v_{(k)}^{(r)}\left(\alpha_{(k)}^{(r)}\right)$. Cette dernière étape qui consiste à représenter l'optimisation sur le monocristal comme des optimisations scalaires indépendantes sur chaque système de glissement, pose la question de l'optimalité de la linéarisation à l'échelle du monocristal. En effet, les auteurs ont fait l'hypothèse d'une forme particulière pour le comportement linéaire optimal du monocristal. Nous pouvons nous interroger sur l'importance de cette hypothèse vis-à-vis de l'optimalité du résultat. La question qui peut être posée est donc : est-ce qu'en utilisant une forme plus générale pour $\mathbb{M}^{(r)}$, ne respectant pas nécessairement la cinématique du monocristal, de meilleurs résultats peuvent être obtenus ? C'est l'extension anisotrope de la formulation variationnelle proposée par Ponte Castañeda et Suquet [161, 84] qui permet de répondre à cette question.

⁶Les indices et exposants k et r seront implicites lorsqu'aucune confusion n'est possible.

⁷Il est également supposé positif et nul en zéro.

⁸L'inégalité apparaissant à l'équation (3.17b) est due à l'observation suivante : $\forall \alpha < 0, \quad f^*(\alpha) = f^*(0) = f(0) = 0$ du fait de (3.17a) et de la positivité de f .

3.2.1.b Formulation tensorielle de Ponte Castañeda et Suquet

Cette approche est l'application à un milieu polycristallin de la généralisation tensorielle ou anisotrope, du principe variationnel de Ponte Castañeda développé dans [161]. Le point de départ de cette formulation est l'expression tensorielle de la dualité⁹ obtenue à partir d'une généralisation de la démarche précédente. Sans faire d'hypothèse sur l'anisotropie de $\mathbb{M}^{(r)}$ nous écrivons maintenant :

$$u^{(r)}(\underline{\sigma}) = \sum_k \Phi_{(k)}^{(r)}(\tau_{(k)}^{(r)}) = \sum_k f_{(k)}^{(r)}(2\mathfrak{m}_{(k)}^{(r)} :: \sigma) = \sum_k g_{(k)}^{(r)}(\sigma) = G^{(r)}(\sigma) \quad (3.19)$$

avec $\mathfrak{m}_{(k)}^{(r)} = \underline{\underline{\mu}}_{(k)}^{(r)} \otimes \underline{\underline{\mu}}_{(k)}^{(r)}$ et $\sigma = \frac{1}{2}\underline{\underline{\sigma}} \otimes \underline{\underline{\sigma}}$. Afin d'obtenir une relation de dualité sur les champs de tenseurs \mathfrak{s} d'ordre quatre possédant les symétries des tenseurs des modules, c'est-à-dire tels que :

$$s_{ijkl} = s_{klij} = s_{jikl}, \quad (3.20)$$

les fonctions $G^{(r)}$ et $g_{(k)}^{(r)}$ doivent être prolongées à cet espace. On pose donc (3.21), ce qui constitue bien un prolongement convexe pour $g_{(k)}^{(r)}$.

$$g_{(k)}^{(r)}(\mathfrak{s}) = \begin{cases} f_{(k)}^{(r)}(2\mathfrak{m}_{(k)}^{(r)} :: \mathfrak{s}) & \text{pour } \mathfrak{m}_{(k)}^{(r)} :: \mathfrak{s} \geq 0 \\ +\infty & \text{sinon} \end{cases} \quad (3.21)$$

La définition de $g_{(k)}^{(r)}$ est très proche de celle de $f_{(k)}^{(r)}$ mais elle n'est pas équivalente car dans le cas général, la relation $\mathfrak{s} \mapsto \mathfrak{m}_{(k)}^{(r)} :: \mathfrak{s}$ n'est pas bijective et ne constitue pas un changement de variables. A partir de cette définition, l'expression de $G^{(r)}$ qui, étant une somme de fonctions convexes est donc elle-même une fonction convexe, est donnée par (3.22).

$$\forall \mathfrak{s}, \quad G^{(r)}(\mathfrak{s}) = \sum_k g_{(k)}^{(r)}(\mathfrak{s}) \quad (3.22)$$

On considère maintenant les relations de dualité pour $G^{(r)}$ en introduisant le module sécant \mathbb{M} qui, rappelons-le, ne possède plus a priori la symétrie liée à la cinématique des monocristaux.

$$G^{(r)*}(\mathbb{M}) = \sup_{\mathfrak{s}} \left\{ \mathbb{M} :: \mathfrak{s} - G^{(r)}(\mathfrak{s}) \right\} \quad (3.23a)$$

$$G^{(r)}(\mathfrak{s}) = \sup_{\mathbb{M}} \left\{ \mathbb{M} :: \mathfrak{s} - G^{(r)*}(\mathbb{M}) \right\} \quad (3.23b)$$

$$= \sup_{\mathbb{M}} \left\{ \mathbb{M} :: \mathfrak{s} - \left(\sum_k g_{(k)}^{(r)} \right)^*(\mathbb{M}) \right\} \quad (3.23c)$$

$G^{(r)}$ étant une somme de fonctions convexes, son dual convexe est l'inf-convolution des transformées de Legendre-Fenchel [33, 54] des $g_{(k)}^{(r)}$ (annexe B.2). Or celles-ci s'expriment sous la forme (3.24)

$$g_{(k)}^{(r)*}(\mathbb{M}) = \sup_{\mathfrak{s} | \mathfrak{m}_{(k)}^{(r)} :: \mathfrak{s} \geq 0} \left\{ \mathbb{M} :: \mathfrak{s} - g_{(k)}^{(r)}(\mathfrak{s}) \right\} \quad (3.24)$$

où l'optimisation est limitée aux \mathfrak{s} tels que $\mathfrak{m}_{(k)}^{(r)} :: \mathfrak{s} \geq 0$, car $g_{(k)}^{(r)}$ vaut $+\infty$ lorsque cette condition n'est pas vérifiée (3.21). Pour réaliser cette optimisation, \mathfrak{s} va être décomposé en partie proportionnelle et orthogonale à $\mathfrak{m}_{(k)}^{(r)}$:

$$\mathfrak{s} = 2s\mathfrak{m}_{(k)}^{(r)} + \mathfrak{s}^\perp \quad \text{avec} \quad 2s = \frac{\mathfrak{s} :: \mathfrak{m}_{(k)}^{(r)}}{\mathfrak{m}_{(k)}^{(r)} :: \mathfrak{m}_{(k)}^{(r)}} \quad \text{et} \quad \mathfrak{s}^\perp :: \mathfrak{m}_{(k)}^{(r)} = 0 \quad (3.25)$$

⁹En effet, si l'on ne réduit pas le problème à des optimisations scalaires indépendantes sur les $\alpha_{(k)}^{(r)}$, en faisant l'hypothèse que le module sécant pour tout monocristal s'écrit sous la forme (2.69), il faut rechercher un tenseur optimal.

Ainsi, on peut réécrire (3.24) et (3.21) en notant que $\mathfrak{m}_{(k)}^{(r)} :: \mathfrak{m}_{(k)}^{(r)} = 1/4$:

$$g_{(k)}^{(r)*}(\mathbb{M}) = \sup_{s, s^\perp} \left\{ 2s\mathbb{M} :: \mathfrak{m}_{(k)}^{(r)} + \mathbb{M} :: s^\perp - g_{(k)}^{(r)} \left(2s\mathfrak{m}_{(k)}^{(r)} + s^\perp \right) \right\} \quad (3.26)$$

$$g_{(k)}^{(r)}(s) = \begin{cases} f_{(k)}^{(r)}(s) & \text{pour } s \geq 0 \\ +\infty & \text{sinon} \end{cases} \quad (3.27)$$

on en déduit donc l'écriture suivante :

$$g_{(k)}^{(r)*}(\mathbb{M}) = \sup_{\substack{s \geq 0 \\ s^\perp}} \left\{ 2s\mathbb{M} :: \mathfrak{m}_{(k)}^{(r)} + \mathbb{M} :: s^\perp - f_{(k)}^{(r)}(s) \right\} \quad (3.28)$$

– Si \mathbb{M} est tel que : $\mathbb{M} :: s^\perp \neq 0$ alors $g_{(k)}^{(r)*}(\mathbb{M}) = +\infty$.

– Si \mathbb{M} est tel que : $\mathbb{M} :: s^\perp = 0$ alors on peut poser $\mathbb{M} = 2\alpha_{(k)}^{(r)}\mathfrak{m}_{(k)}^{(r)}$ et

$$g_{(k)}^{(r)*}(\mathbb{M}) = \sup_{\substack{s \geq 0 \\ s^\perp}} \left\{ \alpha_{(k)}^{(r)}s + 2\alpha_{(k)}^{(r)}\mathfrak{m}_{(k)}^{(r)} :: s^\perp - f_{(k)}^{(r)}(s) \right\} = \sup_{s \geq 0} \left\{ \alpha_{(k)}^{(r)}s - f_{(k)}^{(r)}(s) \right\} = f_{(k)}^{(r)*}(\alpha_{(k)}^{(r)}) \quad (3.29)$$

On en déduit donc au final l'expression de la transformée de Legendre-Fenchel de $g_{(k)}^{(r)}$.

$$g_{(k)}^{(r)*}(\mathbb{M}) = \begin{cases} f_{(k)}^{(r)*}(\alpha_{(k)}^{(r)}) & \text{pour } \mathbb{M} = 2\alpha_{(k)}^{(r)}\mathfrak{m}_{(k)}^{(r)} \\ +\infty & \text{sinon} \end{cases} \quad (3.30)$$

En revenant à l'expression de $G^{(r)*}$ et en considérant le fait que $g_{(k)}^{(r)*}(\mathbb{M}) = +\infty$ lorsque \mathbb{M} n'est pas proportionnel à $\mathfrak{m}_{(k)}^{(r)}$, on obtient les expressions (3.31).

$$G^{(r)*}(\mathbb{M}) = \inf_{\forall k, \mathbb{M}_k \geq 0} \left\{ g_{(1)}^{(r)*} \left(\mathbb{M} - \sum_{k>1} \mathbb{M}_k \right) + \sum_{k>1} g_{(k)}^{(r)*}(\mathbb{M}_k) \right\} \quad (3.31a)$$

$$= \inf_{\substack{\forall k \\ \mathbb{M}_k = \alpha_{(k)}^{(r)}\mathfrak{m}_{(k)}^{(r)} \\ \alpha_{(k)}^{(r)} \geq 0}} \left\{ g_{(1)}^{(r)*} \left(\mathbb{M} - \sum_{k>1} \mathbb{M}_k \right) + \sum_{k>1} g_{(k)}^{(r)*}(\mathbb{M}_k) \right\} \quad (3.31b)$$

$$= \inf_{\alpha_{(k)}^{(r)} \geq 0} \sum_k f_{(k)}^{(r)*}(\alpha_{(k)}^{(r)}) \quad (3.31c)$$

où \mathbb{M} est nécessairement combinaison linéaire¹⁰, des $\mathfrak{m}_{(k)}^{(r)}$ pour que $G^{(r)*}$ soit fini. Au final, (3.23b) se réécrit (3.18b).

$$u^{(r)}(\underline{\sigma}) = \sup_{\alpha_{(k)}^{(r)} \geq 0} \left\{ \sum_k \alpha_{(k)}^{(r)} \left(\tau_{(k)}^{(r)} \right)^2 - \sum_k v_{(k)}^{(r)}(\alpha_{(k)}^{(r)}) \right\} \quad (3.32)$$

Expression similaire à celle obtenue par deBotton et Ponte Castañeda dans un cas (en apparence) simplifié. Dans le cadre de cette extension, on retrouve donc bien la relation variationnelle de [43] présentée au paragraphe 3.2.1.a. Avec cette approche, la forme (2.69) apparaît spontanément sans faire d'hypothèse a priori.

¹⁰Cette combinaison linéaire doit en outre être à termes positifs. Cette positivité est liée au fait que pour $\alpha_{(k)}^{(r)} < 0$ on a $g_{(k)}^{(r)*}(\mathbb{M}_k) = g_{(k)}^{(r)*}(0)$ et à la croissance de la fonction $g_{(k)}^{(r)*}$. En effet, en considérant la relation (3.31a), on s'aperçoit que le choix d'un $\alpha_{(k')}^{(r)} < 0$ conduit à l'égalité $g_{(k')}^{(r)*}(\mathbb{M}_k) = g_{(k')}^{(r)*}(0)$ et à l'inégalité $g_{(1)}^{(r)*}(\mathbb{M} - \sum_{k>1} \mathbb{M}_k) > g_{(1)}^{(r)*}(\mathbb{M} - \sum_{\substack{k>1 \\ k \neq k'}} \mathbb{M}_k)$, l'infimum rejettera donc toujours cette situation. On peut ainsi se restreindre à une optimisation sur les $\alpha_{(k)}^{(r)} \geq 0$.

Remarque : Extension arbitraire des potentiels

La formulation proposée ici permet de répondre à la question que nous nous posons, mais au prix d'une extension non physique des potentiels. En effet, l'espace dans lequel la variable \mathbf{s} est définie, est "trop grand" par rapport à l'espace d'intérêt des tenseurs de la forme $\underline{\underline{\sigma}} \otimes \underline{\underline{\sigma}}$. On notera que \mathbf{s} évolue en dimension 21, alors que $\underline{\underline{\sigma}} \otimes \underline{\underline{\sigma}}$ évolue en dimension 6. Cette extension est utile malgré tout car on ne peut mettre en dualité que des espaces de même dimension, ce qui est bien le cas des tenseurs \mathbf{s} et \mathbb{M} . L'introduction de ces dimensions supplémentaires permet également d'utiliser les méthodes d'optimisation convexe qui sont bien connues et pour lesquelles il existe des algorithmes efficaces. Le prix à payer pour cet avantage est visible en notant l'inégalité :

$$\hat{v}^{(r)}(\mathbb{M}) = \sup_{\mathbf{s} = \frac{1}{2} \underline{\underline{\sigma}} \otimes \underline{\underline{\sigma}}} \left\{ \mathbb{M} :: \mathbf{s} - G^{(r)}(\mathbf{s}) \right\} \leq \sup_{\mathbf{s}} \left\{ \mathbb{M} :: \mathbf{s} - G^{(r)}(\mathbf{s}) \right\} = v^{(r)}(\mathbb{M}) \quad (3.33)$$

Cette inégalité prouve que l'on peut obtenir des solutions non physiques qui limitent la performance de nos encadrements. En effet, les inégalités précédentes se réécrivent sous la forme (3.34) pour un $\underline{\underline{\sigma}}$ donné :

$$u^{(r)}(\underline{\underline{\sigma}}) \geq \mathbb{M} :: \sigma - \hat{v}^{(r)}(\mathbb{M}) \geq \mathbb{M} :: \sigma - v^{(r)}(\mathbb{M}) \quad (3.34)$$

Deux conclusions découlent de ces inégalités :

- Dans le cadre d'une optimisation sur un champ de tenseurs de la forme

$$\mathbb{M}(\underline{\underline{x}}) = \sum_{k,r} \chi^{(r)}(\underline{\underline{x}}) 2\alpha_{(k)}^{(r)}(\underline{\underline{x}}) \mathfrak{m}_{(k)}^{(r)} \quad (3.35)$$

avec $\alpha_{(k)}^{(r)}(\underline{\underline{x}}) \geq 0$, l'équation (3.18b) assure que ces inégalités sont des égalités.

- Par contre, en pratique, les bornes obtenues à l'aide de $\hat{v}^{(r)}$ sont meilleures, c'est-à-dire plus proches de la solution réelle, lorsque l'on se restreint à des champs homogènes par phase.

Les différences entre ces développements sont liées au prolongement convexe des potentiels ; ainsi suivant le choix du prolongement qui est fait les résultats pourront être différents. Ce type de formulation, complexe dans sa mise en œuvre a été mis en place par Idiart [84, 88, 89] sur des cas simplifiés. Nous nous en tiendrons pour notre part à la forme "relâchée" du principe variationnel utilisant la fonction v .

3.2.2 Homogénéisation du polycristal

En reprenant l'expression du potentiel en tout point de tous les monocristaux (3.18b), on peut écrire l'énergie en tout point de la structure polycristalline.

$$u(\underline{\underline{x}}, \underline{\underline{\sigma}}) = \sup_{\alpha_{(k)}^{(r)} \geq 0} \left\{ \sum_r \chi^{(r)}(\underline{\underline{x}}) \sum_k \alpha_{(k)}^{(r)} \left[\tau_{(k)}^{(r)} \right]^2 - \sum_r \chi^{(r)}(\underline{\underline{x}}) \sum_k v_{(k)}^{(r)}(\alpha_{(k)}^{(r)}) \right\} \quad (3.36)$$

$$= \sup_{\mathbb{M} \geq 0} \left\{ \mathbb{M} :: \sigma - v(\underline{\underline{x}}, \alpha_{(k)}^{(r)}) \right\} \quad (3.37)$$

On reconnaît dans le terme $u_0(\underline{\underline{x}}, \underline{\underline{\sigma}}) = \frac{1}{2} \sum_r \chi^{(r)}(\underline{\underline{x}}) \sum_k 2\alpha_{(k)}^{(r)} \left[\tau_{(k)}^{(r)} \right]^2$ une énergie de milieu linéaire, c'est le milieu linéaire de comparaison (MLC). Le potentiel effectif de la structure est donné par le principe de minimum de l'énergie complémentaire.

Comme nous considérerons plusieurs échelles dans le polycristal une notation spécifique doit être introduite ; à l'échelle du matériau les champs seront notés par une majuscule surmontée d'une barre, les grandeurs effectives seront quant à elles indiquées par deux tildes. A l'échelle des phases, les champs seront notés en majuscule, les grandeurs effectives seront repérées par un tilde et la position courante sera notée $\underline{\underline{X}}$; enfin à l'échelle cristalline les champs seront notés en minuscule. Ces conventions sont rappelées sur le schéma de la figure 3.3.

3.2.2.a Forme à une transition d'échelle

On se place dans le cadre de la démarche de redéfinition des phases de la section 3.1.1. L'utilisation du principe de minimum de l'énergie complémentaire à une transition d'échelle conduit à l'équation

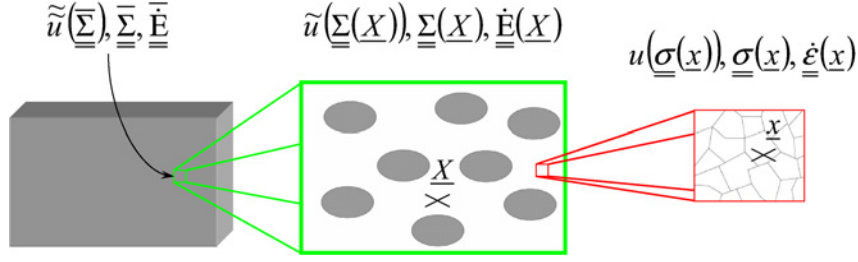


FIG. 3.3: Notations utilisées dans la suite pour les différentes échelles considérées.

suivante¹¹ où r désigne un couple (orientation, phase) tel que décrit au §3.1.1 :

$$\tilde{u}(\underline{\Sigma}) = \underset{\underline{\sigma}(\underline{x}) \in \mathcal{S}^m(\underline{\Sigma})}{\text{Min}} \langle u(\underline{x}, \underline{\sigma}(\underline{x})) \rangle_{\Omega_{\underline{x}}} \quad (3.38a)$$

$$= \underset{\underline{\sigma}(\underline{x}) \in \mathcal{S}^m(\underline{\Sigma})}{\text{Min}} \left\{ \underset{\alpha_{(k)}^{(r)}(\underline{x}) \geq 0}{\text{Sup}} \left[\langle u_0(\underline{x}, \underline{\sigma}(\underline{x})) \rangle_{\Omega_{\underline{x}}} - \left\langle \sum_r \chi^{(r)}(\underline{x}) \sum_k v_{(k)}^{(r)}(\alpha_{(k)}^{(r)}(\underline{x})) \right\rangle_{\Omega_{\underline{x}}} \right] \right\} \quad (3.38b)$$

et où \tilde{u} décrit l'énergie effective du matériau polycristallin.

En utilisant le théorème du point selle (fonctionnelle concave par rapport à α , convexe par rapport à $\underline{\sigma}$) pour interchanger les opérateurs Min et Sup, il vient :

$$\tilde{u}(\underline{\Sigma}) = \underset{\alpha_{(k)}^{(r)}(\underline{x}) \geq 0}{\text{Sup}} \left\{ \tilde{u}_0(\underline{\Sigma}) - \left\langle \sum_r \chi^{(r)}(\underline{x}) \sum_k v_{(k)}^{(r)}(\alpha_{(k)}^{(r)}(\underline{x})) \right\rangle_{\Omega_{\underline{x}}} \right\} \quad (3.39a)$$

$$\tilde{u}_0(\underline{\Sigma}) = \underset{\underline{\sigma}(\underline{x}) \in \mathcal{S}^m(\underline{\Sigma})}{\text{Min}} \left\{ \left\langle \sum_r \chi^{(r)}(\underline{x}) \sum_k \alpha_{(k)}^{(r)}(\underline{x}) [\tau_{(k)}^{(r)}(\underline{x})]^2 \right\rangle_{\Omega_{\underline{x}}} \right\} \quad (3.39b)$$

où, $\tilde{u}_0(\underline{\Sigma})$ décrit le comportement du MLC.

En considérant, conformément aux hypothèses classiques, $\alpha_{(k)}^{(r)}(\underline{x}) = \alpha_{(k)}^{(r)}$ i.e. en annulant de force l'hétérogénéité au sein des familles de constituants de même orientation et structure cristalline, on obtient :

$$\tilde{u}(\underline{\Sigma}) \geq \underset{\alpha_{(k)}^{(r)} \geq 0}{\text{Sup}} \left\{ \tilde{u}_0(\underline{\Sigma}) - \sum_r \sum_k c^r v_{(k)}^{(r)}(\alpha_{(k)}^{(r)}) \right\} = \underset{\alpha_{(k)}^{(r)} \geq 0}{\text{Sup}} \left\{ \tilde{u}_0(\underline{\Sigma}) - V(\alpha_{(k)}^{(r)}) \right\} \quad (3.40)$$

Ici, $\tilde{u}_0(\underline{\Sigma})$ décrit le comportement effectif d'un milieu linéaire de comparaison homogène par phase (généralisée), que l'on peut évaluer par des méthodes classiques relatives aux milieux hétérogènes linéaires. Ainsi, rechercher les $\alpha_{(k)}^{(r)}$ optimaux consiste à maximiser une fonctionnelle.

3.2.2.b Forme à deux transitions d'échelle

Afin de pouvoir traiter différemment la représentation des phases cristallographiques et celle de l'orientation des cristaux dans le matériau, il peut être intéressant d'obtenir une formulation variationnelle à deux transitions d'échelles. Pour obtenir une telle relation, il suffit de combiner la méthode de linéarisation choisie (3.36) avec le principe de minimum à deux transitions d'échelles (3.11b) introduit en §3.1.2.a.

$$\tilde{u}(\underline{\Sigma}) = \underset{\underline{\Sigma}(X) \in \mathcal{S}^m(\underline{\Sigma})}{\text{Min}} \left\{ \left\langle \underset{\underline{\sigma}(\underline{x}) \in \mathcal{S}^m(\underline{\Sigma}(X))}{\text{Min}} \langle u(\underline{x}, \underline{\sigma}(\underline{x})) \rangle_{(\omega(\underline{x}))_{\underline{x}}} \right\rangle_{\Omega_{\underline{x}}} \right\} \quad (3.41a)$$

$$u(\underline{x}, \underline{\sigma}) = \underset{\mathbb{M} \geq 0}{\text{Sup}} \{ \mathbb{M} :: \sigma - v(\underline{x}, \mathbb{M}) \} \quad (3.41b)$$

¹¹ La permutation de l'intégrale et du Sup est licite car il est équivalent d'optimiser une fonction en tout point puis de calculer sa moyenne spatiale ou d'optimiser directement la fonctionnelle correspondante.

En utilisant le théorème du point selle, cette expression peut être décomposée (3.42a) en un terme linéaire (3.42d) et un terme non linéaire.

$$\tilde{u}(\underline{\Sigma}) = \sup_{\alpha_{(k)}^{(r)}(\underline{x}) \geq 0} \left\{ \tilde{u}_0(\underline{\Sigma}) - V\left(\alpha_{(k)}^{(r)}\right) \right\} \quad (3.42a)$$

$$= \sup_{\alpha_{(k)}^{(r)}(\underline{x}) \geq 0} \left\{ \tilde{u}_0(\underline{\Sigma}) - \left\langle \left\langle \sum_r \chi^{(r)}(\underline{x}) \sum_k v_{(k)}^{(r)}\left(\alpha_{(k)}^{(r)}(\underline{x})\right) \right\rangle_{(\omega(\underline{X}))_{\underline{x}}} \right\rangle_{\Omega_{\underline{X}}} \right\} \quad (3.42b)$$

$$\tilde{u}_0(\underline{\Sigma}) = \min_{\underline{\Sigma}(\underline{X}) \in \mathcal{S}^m(\underline{\Sigma})} \left\{ \langle \tilde{u}_0(\underline{\Sigma}(\underline{X})) \rangle_{\Omega_{\underline{X}}} \right\} \quad (3.42c)$$

$$= \min_{\underline{\Sigma}(\underline{X}) \in \mathcal{S}^m(\underline{\Sigma})} \left\{ \left\langle \left\langle \min_{\underline{\sigma}(\underline{x}) \in \mathcal{S}^m(\underline{\Sigma}(\underline{X}))} \left\langle \sum_r \chi^{(r)}(\underline{x}) \sum_k \alpha_{(k)}^{(r)}(\underline{x}) \left[\tau_{(k)}^{(r)}(\underline{x}) \right]^2 \right\rangle_{(\omega(\underline{X}))_{\underline{x}}} \right\rangle_{\Omega_{\underline{X}}} \right\rangle \right\} \quad (3.42d)$$

En considérant l'homogénéité du comportement au sein des familles d'orientations, on retrouve l'expression (3.40). Mais cette fois la partie linéaire de cette formule peut être obtenue à partir de deux transitions d'échelles successives.

Cette section a décrit la démarche permettant de linéariser le comportement du polycristal afin d'obtenir un MLC homogène par phase caractérisé par une énergie \tilde{u}_0 . Le calcul de cette grandeur constitue un problème d'homogénéisation linéaire. La théorie de l'homogénéisation linéaire nous fournit des méthodes permettant d'obtenir des bornes ou des estimations du comportement tenant compte de la morphologie du composite (particulaire, granulaire ...) et de l'information statistique à laquelle nous avons accès (covariances à 1, 2, ... points d'appui). Le choix des modèles d'homogénéisation linéaire utilisés dans ce travail a fait l'objet du paragraphe 3.1.3.

Remarque 1 : Equivalence avec la mise en cascade des méthodes d'homogénéisation non linéaires

Le développement à deux transitions d'échelles précédent a été conduit à partir d'un principe de minimum à deux transitions d'échelle appliqué au MLC, à la suite de la procédure de linéarisation de Ponte Castañeda utilisée à l'échelle la plus fine. Intuitivement, il semble que cette méthode générale soit équivalente à l'application successive de la méthode d'homogénéisation variationnelle pour les deux échelles séparées évoquées à la section 3.1.2.a. Pour s'en convaincre, on peut écrire l'homogénéisation non linéaire pour les familles d'orientations cristallines de chaque phase. On part pour cela de la relation (3.43) où Ω désigne un VER global du matériau.

$$\forall \underline{x} \in \Omega, \quad u(\underline{x}, \underline{\sigma}) = \sup_{\mathbb{M} \geq 0} \{ \mathbb{M} :: \sigma - v(\underline{x}, \mathbb{M}) \} \quad (3.43)$$

L'énergie d'un VER Ω_{φ_I} pour les orientations de la phase I est donnée par (3.44)

$$\forall \underline{x} \in \Omega_{\varphi_I}, \quad \tilde{u}_{\varphi_I}(\underline{\Sigma}) = \min_{\underline{\sigma} \in \mathcal{S}^m(\underline{\Sigma})} \langle u(\underline{x}, \underline{\sigma}(\underline{x})) \rangle_{\Omega_{\varphi_I}} \quad (3.44a)$$

$$= \min_{\underline{\sigma} \in \mathcal{S}^m(\underline{\Sigma})} \left\langle \sup_{\mathbb{M}(\underline{x}) \geq 0} [\mathbb{M}(\underline{x}) :: \sigma(\underline{x}) - v(\underline{x}, \mathbb{M}(\underline{x}))] \right\rangle_{\Omega_{\varphi_I}} \quad (3.44b)$$

$$= \sup_{\mathbb{M}(\underline{x}) \geq 0} \left\{ \min_{\underline{\sigma} \in \mathcal{S}^m(\underline{\Sigma})} \langle \mathbb{M}(\underline{x}) :: \sigma(\underline{x}) \rangle_{\Omega_{\varphi_I}} - \langle v(\underline{x}, \mathbb{M}(\underline{x})) \rangle_{\Omega_{\varphi_I}} \right\} \quad (3.44c)$$

$$= \sup_{\mathbb{M}(\underline{x}) \geq 0} \left\{ \tilde{\mathbb{M}}_{\varphi_I}^0(\mathbb{M}(\underline{x})) :: \left(\frac{1}{2} \underline{\Sigma} \otimes \underline{\Sigma} \right) - V_{\varphi_I}(\mathbb{M}(\underline{x})) \right\} \quad (3.44d)$$

Pour pouvoir appliquer la procédure variationnelle, cette fois à l'échelle d'un VER du matériau, il nous faut étendre la définition de \tilde{u}_{φ_I} aux tenseurs d'ordre quatre ayant même symétrie que les tenseurs des modules et vérifier les conditions d'application de la méthode, c'est-à-dire la convexité de ce potentiel

vis-à-vis de Σ . Ce qui découle simplement de (3.44d) :

$$\forall \lambda \in [0; 1], \quad \sup_{\mathbb{M}(\underline{x}) \geq 0} \left\{ \tilde{\mathbb{M}}_{\varphi_I}^0 :: [\lambda \Sigma_1 + (1 - \lambda) \Sigma_2] - V_{\varphi_I}(\mathbb{M}(\underline{x})) \right\} \quad (3.45a)$$

$$= \sup_{\mathbb{M}(\underline{x}) \geq 0} \left\{ \lambda \left[\tilde{\mathbb{M}}_{\varphi_I}^0 :: \Sigma_1 - V_{\varphi_I}(\mathbb{M}(\underline{x})) \right] + (1 - \lambda) \left[\tilde{\mathbb{M}}_{\varphi_I}^0 :: \Sigma_2 - V_{\varphi_I}(\mathbb{M}(\underline{x})) \right] \right\} \quad (3.45b)$$

$$\leq \lambda \sup_{\mathbb{M}(\underline{x}) \geq 0} \left\{ \tilde{\mathbb{M}}_{\varphi_I}^0 :: \Sigma_1 - V_{\varphi_I}(\mathbb{M}(\underline{x})) \right\} + (1 - \lambda) \sup_{\mathbb{M}(\underline{x}) \geq 0} \left\{ \tilde{\mathbb{M}}_{\varphi_I}^0 :: \Sigma_2 - V_{\varphi_I}(\mathbb{M}(\underline{x})) \right\} \quad (3.45c)$$

On en déduit ainsi que la procédure variationnelle peut s'appliquer à cette échelle.

À ce niveau, la linéarisation de \tilde{u}_{φ_I} s'écrit donc en posant les relations de dualité (3.46) et (3.47) de façon analogue à (3.43).

$$\tilde{u}_{\varphi_I}(\underline{X}, \underline{\Sigma}) = \sup_{\tilde{\mathbb{M}}' \geq 0} \left\{ \tilde{\mathbb{M}}' :: \Sigma - V'(\underline{X}, \tilde{\mathbb{M}}') \right\} \quad (3.46)$$

$$V'(\underline{X}, \tilde{\mathbb{M}}') = \sup_{\Sigma} \left\{ \tilde{\mathbb{M}}' :: \Sigma - \tilde{u}_{\varphi_I}(\underline{X}, \Sigma) \right\} \quad (3.47)$$

$$= \inf_{\mathbb{M}(\underline{x}) \geq 0} \left\{ \sup_{\Sigma} \left[\tilde{\mathbb{M}}' :: \Sigma - \tilde{\mathbb{M}}_{\varphi_I}^0(\mathbb{M}(\underline{x})) :: \Sigma \right] + V_{\varphi_I}(\mathbb{M}(\underline{x})) \right\} \quad (3.48)$$

La dernière expression, obtenue en substituant à \tilde{u}_{φ_I} son expression dans (3.44d), traduit l'enchaînement des formulations variationnelles. On en déduit les égalités suivantes qui prouvent l'équivalence de cette formulation :

$$\tilde{\mathbb{M}}' = \tilde{\mathbb{M}}_{\varphi_I}^0(\mathbb{M}(\underline{x})) \quad \text{et} \quad V'(\underline{X}, \tilde{\mathbb{M}}') = \inf_{\substack{\mathbb{M}(\underline{x}) \geq 0 \\ \mathbb{M}(\underline{x}) | \tilde{\mathbb{M}}_{\varphi_I}^0(\mathbb{M}(\underline{x})) = \tilde{\mathbb{M}}'}} \left\{ V_{\varphi_I}(\mathbb{M}(\underline{x})) \right\} \quad (3.49)$$

En effet, en réinjectant (3.46) et (3.49) dans l'expression de l'énergie à l'échelle macroscopique (3.50a) et en utilisant les permutations déjà présentées, on obtient :

$$\tilde{u}(\underline{\Sigma}) = \min_{\underline{\Sigma}(\underline{X}) \in \mathcal{S}^m(\underline{\Sigma})} \langle \tilde{u}_{\varphi_I}(\underline{X}, \underline{\Sigma}(\underline{X})) \rangle_{\Omega_{\underline{X}}} \quad (3.50a)$$

$$= \min_{\underline{\Sigma} \in \mathcal{S}^m(\underline{\Sigma})} \left\langle \sup_{\mathbb{M}(\underline{x}) \geq 0} \left[\tilde{\mathbb{M}}_{\varphi_I}^0(\mathbb{M}(\underline{x})) :: \Sigma(\underline{X}) - V_{\varphi_I}(\mathbb{M}(\underline{x})) \right] \right\rangle_{\Omega_{\underline{X}}} \quad (3.50b)$$

$$= \sup_{\mathbb{M}(\underline{x}) \geq 0} \left\{ \min_{\underline{\Sigma}(\underline{X}) \in \mathcal{S}^m(\underline{\Sigma})} \left\langle \tilde{\mathbb{M}}_{\varphi_I}^0(\mathbb{M}(\underline{x})) :: \Sigma(\underline{X}) \right\rangle_{\Omega_{\underline{X}}} - \langle V_{\varphi_I}(\mathbb{M}(\underline{x})) \rangle_{\Omega_{\underline{X}}} \right\} \quad (3.50c)$$

$$= \sup_{\mathbb{M}(\underline{x}) \geq 0} \left\{ \tilde{u}_0(\underline{\Sigma}) - V(\mathbb{M}(\underline{x})) \right\} \quad (3.50d)$$

On a donc retrouvé (3.42a) en appliquant deux fois de suite la procédure variationnelle de Ponte Castañeda à deux échelles différentes.

Remarque 2 : forme duale en taux de déformation imposé

La formulation du principe variationnel écrite suivant le potentiel des contraintes :

$$\tilde{u}(\underline{\Sigma}) = \sup_{\alpha_{(k)}^{(r)} \geq 0} \left\{ \tilde{u}_0(\underline{\Sigma}) - V(\alpha_{(k)}^{(r)}) \right\} \quad (3.51)$$

est opérationnelle lorsque le VER polycristallin est soumis à une contrainte macroscopique mais dans le cadre d'une évolution en taux de déformation macroscopique imposé, une formulation suivant le potentiel des déformations serait préférable. On écrit pour cela la dualité des deux potentiels (3.52) en utilisant le

théorème du point selle.

$$\tilde{w}(\underline{\underline{E}}) = \underset{\underline{\underline{\Sigma}}}{\text{Max}} \left[\underline{\underline{E}} : \underline{\underline{\Sigma}} - \underset{\alpha_{(k)}^{(r)} \geq 0}{\text{Sup}} \left\{ \tilde{u}_0(\underline{\underline{\Sigma}}) - V(\alpha_{(k)}^{(r)}) \right\} \right] \quad (3.52a)$$

$$= \underset{\alpha_{(k)}^{(r)} \geq 0}{\text{Inf}} \left\{ \underset{\underline{\underline{\Sigma}}}{\text{Max}} \left[\underline{\underline{E}} : \underline{\underline{\Sigma}} - \tilde{u}_0(\underline{\underline{\Sigma}}) \right] + V(\alpha_{(k)}^{(r)}) \right\} \quad (3.52b)$$

$$= \underset{\alpha_{(k)}^{(r)} \geq 0}{\text{Inf}} \left\{ \tilde{w}_0(\underline{\underline{E}}) + V(\alpha_{(k)}^{(r)}) \right\} \quad (3.52c)$$

Cette relation constitue une propriété importante de la formulation variationnelle, et on a ainsi à minimiser une des deux fonctions suivantes selon le type de chargement :

$$\tilde{w}_0 + \sum_{r,k} c^r v_{(k)}^{(r)}(\alpha_{(k)}^{(r)}) \quad \text{ou} \quad -\tilde{u}_0 + \sum_{r,k} c^r v_{(k)}^{(r)}(\alpha_{(k)}^{(r)}) \quad (3.53)$$

où seule la partie linéaire est différente.

3.3 Détails liés au comportement en loi puissance

La méthode étant établie, il peut être utile de donner quelques expressions relatives au comportement choisi pour les systèmes de glissements et qui seront utilisées dans l'implémentation du code.

3.3.1 Calcul de $v_{(k)}^{(r)}$

On rappelle la définition de la fonction $v_{(k)}^{(r)}$ associée pour chaque famille cristallographique r au système de glissement k .

$$v(\alpha) = \underset{\tau^2}{\text{Sup}} \left\{ \alpha \tau^2 - \Phi(\tau) \right\}$$

$$\Phi(\tau) = \frac{\dot{\gamma}_0 \tau_c}{n+1} \left[\frac{|\tau|}{\tau_c} \right]^{n+1} \quad \text{avec } n > 1$$

Dans le cas d'un potentiel de glissement en loi puissance (2.71) le calcul conduit à l'expression (3.54b).

$$v(\alpha) = \alpha \left[\frac{2\alpha\tau_c}{\dot{\gamma}_0} \right]^{\frac{2}{n-1}} (\tau_c)^2 - \frac{\dot{\gamma}_0 \tau_c}{1+n} \left[\frac{2\alpha\tau_c}{\dot{\gamma}_0} \right]^{\frac{n+1}{n-1}} \quad (3.54a)$$

$$= \frac{1}{2} \frac{n-1}{n+1} \tau_c \dot{\gamma}_0 \left[\frac{2\alpha\tau_c}{\dot{\gamma}_0} \right]^{\frac{n+1}{n-1}} \quad (3.54b)$$

3.3.2 Simplification pour des $n_{(k)}^{(r)}$ identiques

Dans le cas où les exposants n sont identiques pour tous les systèmes du polycristal, on peut montrer qu'il est possible de se ramener à une optimisation numérique sur une variable de moins. En effet, on peut mettre en évidence un couplage entre les $\alpha_{(k)}^{(r)}$. Ce couplage est lié à l'homogénéité respectivement de degré 1 et $\frac{n+1}{n-1}$ des fonctions \tilde{u}_0 et $v_{(k)}^{(r)}$ par rapport aux $\alpha_{(k)}^{(r)}$. Pour effectuer la simplification proposée, nous allons passer du jeu de variable $\left\{ \alpha_{(k)}^{(r)} \right\}$ à un ensemble $\left\{ \lambda, \tilde{\alpha}_{(k)}^{(r)} \right\}$ où :

$$\lambda = \alpha_{(k')}^{(r')} \quad \text{et} \quad \forall (k, r), \quad \tilde{\alpha}_{(k)}^{(r)} = \frac{\alpha_{(k)}^{(r)}}{\lambda} \quad (3.55)$$

Il est clair que les $\tilde{\alpha}_{(k)}^{(r)}$ comprennent un élément de moins, car $\tilde{\alpha}_{(k')}^{(r')} = 1$. A partir de ces nouvelles variables, nous pouvons réécrire la fonction à optimiser :

$$\tilde{u}_0(\alpha_{(k)}^{(r)}) - \sum_{r,k} c^r v_{(k)}^{(r)}(\alpha_{(k)}^{(r)}) = \lambda \tilde{u}_0(\tilde{\alpha}_{(k)}^{(r)}) - \lambda^{\frac{n+1}{n-1}} \sum_{r,k} c^r v_{(k)}^{(r)}(\tilde{\alpha}_{(k)}^{(r)}) \quad (3.56)$$

La condition d'optimalité de cette fonction vis-à-vis de λ peut s'expliciter au travers de (3.57).

$$\frac{\partial}{\partial \lambda} \left[\lambda \tilde{u}_0 \left(\tilde{\alpha}_{(k)}^{(r)} \right) - \lambda^{\frac{n+1}{n-1}} \sum_{r,k} c^r v_{(k)}^{(r)} \left(\tilde{\alpha}_{(k)}^{(r)} \right) \right] = 0 \quad (3.57a)$$

$$\tilde{u}_0 \left(\tilde{\alpha}_{(k)}^{(r)} \right) - \frac{n+1}{n-1} \lambda^{\frac{2}{n-1}} \sum_{r,k} c^r v_{(k)}^{(r)} \left(\tilde{\alpha}_{(k)}^{(r)} \right) = 0 \quad (3.57b)$$

$$\lambda_{\text{opt}} = \left[\frac{n-1}{n+1} \frac{\tilde{u}_0 \left(\tilde{\alpha}_{(k)}^{(r)} \right)}{\sum_{r,k} c^r v_{(k)}^{(r)} \left(\tilde{\alpha}_{(k)}^{(r)} \right)} \right]^{\frac{n-1}{2}} \quad (3.57c)$$

L'utilisation conjointe de (3.57c), (3.56) et (3.42a) conduit à la réécriture suivante où l'optimisation porte sur une variable de moins que la minimisation (3.42a) et où les $\tilde{\alpha}_{(k)}^{(r)}$ forment une famille libre.

$$\tilde{u} = \sup_{\tilde{\alpha}_{(k)}^{(r)} \geq 0} \left[\left(\frac{2}{n+1} \tilde{u}_0^{\frac{n+1}{2}} \right) \left(\frac{n+1}{n-1} \sum_{r,k} c^r v_{(k)}^{(r)} \left(\tilde{\alpha}_{(k)}^{(r)} \right) \right)^{\frac{1-n}{2}} \right] \quad (3.58)$$

Une formulation stable pour $n \rightarrow +\infty$, c'est-à-dire dans le cas plastique parfait, peut être obtenue [161] en réécrivant (3.58) sous la forme proposée en (3.59) et conduisant à la limite à l'expression (3.60)¹².

$$\tilde{u} = \frac{2}{n+1} \left(\inf_{\tilde{\alpha}_{(k)}^{(r)} \geq 0} G \right)^{-n} \quad \text{avec} \quad G = \tilde{u}_0^{-\frac{n+1}{2n}} \left(\frac{n+1}{n-1} \sum_{r,k} c^r v_{(k)}^{(r)} \left(\tilde{\alpha}_{(k)}^{(r)} \right) \right)^{\frac{n-1}{2n}} \quad (3.59)$$

$$G \xrightarrow{n \rightarrow +\infty} \sqrt{\frac{\sum_{r,k} c^r \tilde{\alpha}_{(k)}^{(r)} \left(\tau_{c(k)}^{(r)} \right)^2}{\tilde{u}_0}} \quad (3.60)$$

Une fois l'optimisation numérique effectuée par rapport aux variables $\tilde{\alpha}_{(k)}^{(r)}$, on obtient les $\alpha_{(k)}^{(r)}$ solution, en remultipliant les termes normalisés par λ_{opt} . Les mêmes types de relations peuvent être obtenus en vitesse de déformation imposée en considérant, cette fois, l'homogénéité de \tilde{w}_0 , ce qui conduit aux expressions (3.61) et (3.62), homologues de (3.57c) et (3.58), et à (3.63) dans le cas plastique parfait.

$$\lambda_{\text{opt}} = \left[\frac{n-1}{n+1} \frac{\tilde{w}_0 \left(\tilde{\alpha}_{(k)}^{(r)} \right)}{\sum_{r,k} c^r v_{(k)}^{(r)} \left(\tilde{\alpha}_{(k)}^{(r)} \right)} \right]^{\frac{n-1}{2n}} \quad (3.61)$$

$$\tilde{w} = \inf_{\tilde{\alpha}_{(k)}^{(r)} \geq 0} \left[\frac{2n}{n+1} \tilde{w}_0^{\frac{n+1}{2n}} \left(\frac{n+1}{n-1} \sum_{r,k} c^r v_{(k)}^{(r)} \left(\tilde{\alpha}_{(k)}^{(r)} \right) \right)^{\frac{n-1}{2n}} \right] \quad (3.62)$$

$$\tilde{w} = \inf_{\tilde{\alpha}_{(k)}^{(r)} \geq 0} \left[2 \sqrt{\tilde{w}_0 \sum_{r,k} c^r \tilde{\alpha}_{(k)}^{(r)} \left(\tau_{c(k)}^{(r)} \right)^2} \right] \quad (3.63)$$

3.4 Méthode de minimisation de la fonctionnelle

La formulation variationnelle conduit naturellement à utiliser une procédure d'optimisation sans contraintes. Cette méthode doit permettre un traitement efficace de notre problème et donc être adaptée au cas de fonctions dépendant d'un grand nombre de paramètres. Une description générale et des conseils sur le choix et l'utilisation des procédures d'optimisation numériques peuvent être trouvés, par exemple,

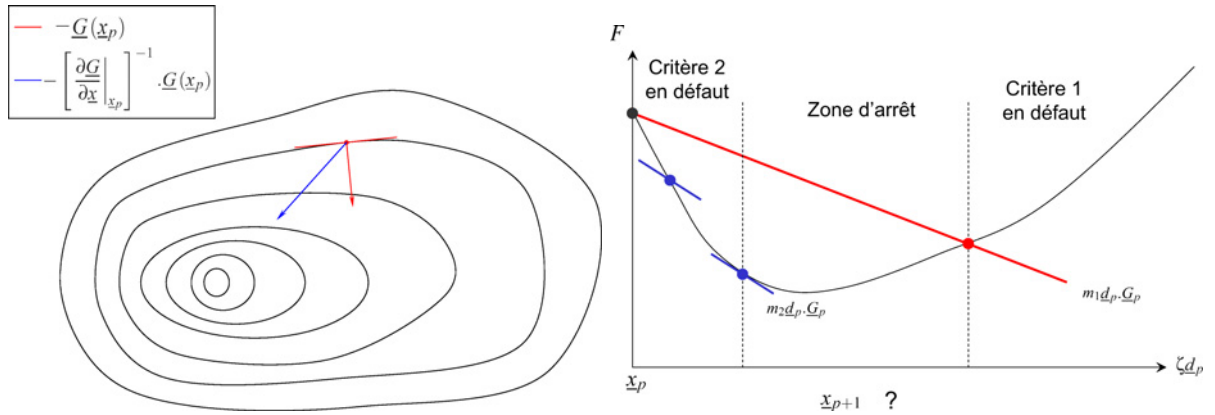
¹²Ce dernier résultat fait aussi intervenir la limite de (3.54b).

dans les références [166, 139, 19]. Nous nous limiterons ici à décrire les grandes lignes de la méthode utilisée. Les procédures de recherche d'optimum ont, en général, une structure en deux étapes. La première étape consiste, tout d'abord, à définir une direction de recherche et, la seconde, à utiliser un algorithme de recherche linéaire (ou directionnel) afin de parcourir une distance optimale dans la direction choisie. Les méthodes de Newton ou de quasi-Newton, auxquelles appartient la procédure L-BFGS que nous utiliserons ici, sont basées sur cette structure et se révèlent particulièrement efficaces dans le cas où un grand nombre de variables interviennent. Ces méthodes utilisent outre la fonction à minimiser $F(\alpha_{(k)}^{(r)})$, donnée par (3.53), le gradient de cette fonction sur l'espace de recherche $G(\alpha_{(k)}^{(r)}) = \frac{\partial F}{\partial \alpha_{(k)}^{(r)}}$. Dans le cas d'une fonction convexe, ce qui est bien la situation envisagée ici, il existe un seul optimum et G s'annule en ce point. Ainsi, partant d'un point \underline{x}_p de l'espace de recherche¹³, cet optimum est atteint en se déplaçant d'un vecteur \underline{d}_p tel que $\underline{x}_{\text{opt.}} = \underline{x}_p + \underline{d}_p$. Lorsque l'on est suffisamment proche de l'optimum le gradient peut être exprimé à l'aide des premiers termes d'un développement de Taylor (3.64a) et nous fournir une direction de descente efficace (3.64b).

$$\underline{G}(\underline{x}_p + \underline{d}_p) \approx \underline{G}(\underline{x}_p) + \underline{d}_p \cdot \left. \frac{\partial \underline{G}}{\partial \underline{x}} \right|_{\underline{x}_p} \approx 0 \quad (3.64a)$$

$$\underline{d}_p = - \left[\left. \frac{\partial \underline{G}}{\partial \underline{x}} \right|_{\underline{x}_p} \right]^{-1} \cdot \underline{G}(\underline{x}_p) \quad (3.64b)$$

Cette direction est en général plus performante que le gradient de la fonction (comme le suggère le schéma fig. 3.4(a)) mais elle nécessite le calcul du hessien (dérivée seconde de la fonction) et son inversion, opérations qui peuvent être très coûteuses lorsque, comme dans le cas présent, le nombre de variables est très important. Les méthodes de quasi-Newton dites "inverses" consistent à ne calculer qu'approxima-



(a) Exemple de directions de descente pour une optimisation bidimensionnelle : en rouge méthode du gradient, en bleu méthode de Newton. Les lignes représentent des isovalues de la fonction à optimiser.

(b) Représentation schématique des critères de Wolfe.

FIG. 3.4: Etapes de la démarche d'optimisation.

tivement l'inverse du hessien. La méthode BFGS (Broyden-Fletcher-Goldfarb-Shanno) se base sur les

¹³ \underline{x}_p représente un vecteur position dans l'espace des α , l'indice p désigne le $p^{\text{ième}}$ pas de la procédure d'optimisation.

approximations successives suivantes :

$$\left[\frac{\partial \underline{G}}{\partial \underline{x}} \right]_{\underline{x}_{p+1}}^{-1} \approx \underline{H}_{p+1} = [\underline{I} - (\underline{u}_{p+1} \otimes \underline{v}_{p+1})] \cdot \underline{H}_p \cdot [\underline{I} - (\underline{u}_{p+1} \otimes \underline{v}_{p+1})^T] \quad (3.65a)$$

$$\underline{u}_{p+1} = \frac{\underline{x}_{p+1} - \underline{x}_p}{(\underline{G}_{p+1} - \underline{G}_p) \cdot (\underline{x}_{p+1} - \underline{x}_p)} \quad (3.65b)$$

$$\underline{v}_{p+1} = \underline{G}_{p+1} - \left(1 - \sqrt{\frac{(\underline{G}_{p+1} - \underline{G}_p) \cdot (\underline{x}_{p+1} - \underline{x}_p)}{\underline{G}_p \cdot (\underline{x}_{p+1} - \underline{x}_p)}} \right) \underline{G}_p \quad (3.65c)$$

On définit un domaine de recherche partant de \underline{x}_p et un pas de recherche initial (des procédures de choix sont décrites dans les références précitées). L'idée de la méthode BFGS est de ne jamais assembler les matrices H , mais de trouver \underline{d}_p à partir de produits scalaires simples avec les vecteurs de mise à jour (3.65b), (3.65c). La variante L-BFGS utilisée ici ne stocke que \underline{H}_0 (pris en général égal à l'identité) et un nombre limité (ici cinq) de vecteurs de mise à jour afin de limiter le stockage mais surtout d'accélérer l'algorithme¹⁴.

Le calcul de \underline{x}_{p+1} utilise la direction du vecteur introduit en (3.64b), mais la norme du déplacement est fixée par une méthode de recherche linéaire. Cette dernière se base sur les critères de Wolfe qui consistent à vérifier que la fonction a suffisamment "décru" et que son gradient a suffisamment "augmenté", c'est-à-dire que nous nous sommes rapprochés suffisamment de la solution. Lorsque l'une des conditions de Wolfe n'est pas respectée alors le domaine de recherche est restreint car une valeur ne respectant pas un des critères signifie que l'on a été trop ou pas assez loin (suivant la condition qui n'a pas été respectée). Les conditions implémentées dans le cas présent peuvent se résumer de la façon suivante, où ζ est la norme du déplacement :

Critère 1	Critère 2	Prescription
$F(\underline{x}_p + \zeta \underline{d}_p) \leq F(\underline{x}_p) + m_1 \zeta \underline{d}_p \cdot \underline{G}_p$	$\underline{d}_p \cdot \underline{G}_{p+1} \leq m_2 \underline{d}_p \cdot \underline{G}_p$	minimisation directionnelle terminée
$F(\underline{x}_p + \zeta \underline{d}_p) > F(\underline{x}_p) + m_1 \zeta \underline{d}_p \cdot \underline{G}_p$	$\underline{d}_p \cdot \underline{G}_{p+1} \leq m_2 \underline{d}_p \cdot \underline{G}_p$	ζ devient la borne haute du domaine de recherche
$F(\underline{x}_p + \zeta \underline{d}_p) \leq F(\underline{x}_p) + m_1 \zeta \underline{d}_p \cdot \underline{G}_p$	$\underline{d}_p \cdot \underline{G}_{p+1} > m_2 \underline{d}_p \cdot \underline{G}_p$	ζ devient la borne basse du domaine de recherche

Ceci peut se représenter graphiquement sous la forme donnée figure 3.4(b). En fait, dans l'algorithme L-BFGS implémenté par Liu et Nocedal [114] et utilisé dans ce travail, le second critère s'écrit $|\underline{d}_p \cdot \underline{G}_{p+1}| \leq |m_2 \underline{d}_p \cdot \underline{G}_p|$ afin d'éviter également que la pente soit trop forte lorsqu'elle est positive. Les paramètres utilisés pour la recherche linéaire sont ceux préconisés dans [114] soit $m_1 = 10^{-4}$ et $m_2 = 0.9$.

Le critère d'arrêt de la procédure d'optimisation se base sur la norme du gradient qui doit être la plus faible possible. Gilormini [66] lors de la programmation initiale de ce code s'est aperçu que la norme du gradient variait de façon inversement proportionnelle à la racine du nombre de grains utilisés lors de la simulation. Il a donc suggéré de renormaliser le gradient par le gradient initial dans le critère d'arrêt, afin d'éviter tout biais lié au nombre de grains ; le critère de convergence prend ainsi la forme (3.66).

$$\frac{\sqrt{\underline{G}_p \cdot \underline{G}_p}}{\sqrt{\underline{G}_0 \cdot \underline{G}_0}} \leq \eta \quad (3.66)$$

où η caractérise la précision recherchée. Cette valeur de η doit être de l'ordre de la précision utilisée pour le calcul de la fonction à minimiser et de son gradient et ainsi être fixée par la précision de la procédure auto-cohérente mais également par la précision du calcul de la dérivée du tenseur d'Eshelby. On privilégiera ainsi des valeurs de η comprises entre 10^{-4} et 10^{-9} (valeur imposée pour les calculs relatifs au tenseur d'Eshelby).

3.4.1 Calcul du gradient de la fonctionnelle à minimiser

Nous avons vu que la procédure précédente nécessitait le calcul du gradient de la fonction F , nous allons donc expliciter ici la méthode permettant d'obtenir cette expression. La forme de la fonctionnelle des contraintes à minimiser a été présentée précédemment (3.53).

$$F\left(\alpha_{(k)}^{(r)}\right) = -\tilde{u}_0 + \sum_{r,k} c^r v_{(k)}^{(r)} \left(\alpha_{(k)}^{(r)}\right) \quad (3.67)$$

¹⁴ L'algorithme complet de la méthode L-BFGS utilisée est détaillé dans [114].

Sa dérivée s'écrit suivant (3.68) et se simplifie en considérant les relations (3.69).

$$\frac{\partial F}{\partial \alpha_{(k)}^{(r)}} = - \frac{\partial \tilde{u}_0}{\partial \alpha_{(k)}^{(r)}} + c^r \left(v_{(k)}^{(r)} \right)' \left(\alpha_{(k)}^{(r)} \right) \quad (3.68a)$$

$$= - \frac{1}{2} \left(\underline{\underline{\Sigma}} \otimes \underline{\underline{\Sigma}} \right) :: \frac{\partial \tilde{\mathbb{M}}_0}{\partial \mathbb{M}^{(r)}} :: \frac{\partial \mathbb{M}^{(r)}}{\partial \alpha_{(k)}^{(r)}} + c^r \left(v_{(k)}^{(r)} \right)' \left(\alpha_{(k)}^{(r)} \right) \quad (3.68b)$$

$$\langle \underline{\underline{\sigma}} \otimes \underline{\underline{\sigma}} \rangle_r = \frac{1}{c^r} \left(\underline{\underline{\Sigma}} \otimes \underline{\underline{\Sigma}} \right) :: \frac{\partial \tilde{\mathbb{M}}_0}{\partial \mathbb{M}^{(r)}} \quad (3.69a)$$

$$\frac{\partial \mathbb{M}^{(r)}}{\partial \alpha_{(k)}^{(r)}} = 2 \underline{\underline{\mu}}_{(k)}^{(r)} \otimes \underline{\underline{\mu}}_{(k)}^{(r)} \quad \text{car} \quad \mathbb{M}^{(r)} = 2 \sum_k \alpha_{(k)}^{(r)} \underline{\underline{\mu}}_{(k)}^{(r)} \otimes \underline{\underline{\mu}}_{(k)}^{(r)} \quad (3.69b)$$

Au final, l'expression du gradient prend la forme simple donnée par l'équation (3.70).

$$\frac{\partial F}{\partial \alpha_{(k)}^{(r)}} = - c^r \langle \underline{\underline{\sigma}} \otimes \underline{\underline{\sigma}} \rangle_r :: \left(\underline{\underline{\mu}}_{(k)}^{(r)} \otimes \underline{\underline{\mu}}_{(k)}^{(r)} \right) + c^r \left(v_{(k)}^{(r)} \right)' \left(\alpha_{(k)}^{(r)} \right) \quad (3.70a)$$

$$= - c^r \left[\left\langle \left(\tau_{(k)}^{(r)} \right)^2 \right\rangle - \left(v_{(k)}^{(r)} \right)' \left(\alpha_{(k)}^{(r)} \right) \right] \quad (3.70b)$$

Le calcul du gradient se décompose en deux parties, l'une liée à la partie linéarisée et faisant intervenir le calcul des seconds moments des contraintes et l'autre définie à partir de la dérivée de $v_{(k)}^{(r)}$ par rapport aux $\alpha_{(k)}^{(r)}$. Dans le cas d'un comportement en loi puissance, il existe une forme explicite pour la dérivée de la partie non linéaire. Celle-ci repose sur (3.54b) qui permet d'obtenir directement (3.71).

$$\frac{\partial v(\alpha)}{\partial \alpha} = \frac{\partial}{\partial \alpha} \left(\frac{1}{2} \frac{n-1}{n+1} \tau_c \dot{\gamma}_0 \left[\frac{2\alpha\tau_c}{\dot{\gamma}_0} \right]^{\left(\frac{n+1}{n-1} \right)} \right) \quad (3.71a)$$

$$= \frac{\tau_c \dot{\gamma}_0}{2\alpha} \left[\frac{2\alpha\tau_c}{\dot{\gamma}_0} \right]^{\left(\frac{n+1}{n-1} \right)} = \frac{n+1}{n-1} \frac{v(\alpha)}{\alpha} \quad (3.71b)$$

Il n'y a pas d'expression analytique pour les seconds moments $\langle \underline{\underline{\sigma}} \otimes \underline{\underline{\sigma}} \rangle_r$; nous utiliserons donc la méthode de calcul semi-analytique proposée par Brenner, Castelnau et Badea [26] pour les déterminer. Le détail de cette technique est décrit à la section 3.4.2 où elle est appliquée aux différents modèles d'homogénéisation à une et deux transitions d'échelle proposés dans notre travail.

Remarque 1 : Variables utilisées en pratique

En fait, l'optimisation se fait par rapport à la variable $x_{(k)}^{(r)}$ avec $\alpha_{(k)}^{(r)} = x_{(k)}^{(r)2}$ afin de supprimer la contrainte de positivité qui apparaît dans la formulation variationnelle de Ponte Castañeda. Il faut alors utiliser l'expression (3.72) pour exprimer le gradient de la fonctionnelle par rapport à la variable $x_{(k)}^{(r)}$.

$$\frac{\partial F}{\partial x_{(k)}^{(r)}} = \frac{\partial F}{\partial \alpha_{(k)}^{(r)}} \frac{\partial \alpha_{(k)}^{(r)}}{\partial x_{(k)}^{(r)}} = 2x_{(k)}^{(r)} \frac{\partial F}{\partial \alpha_{(k)}^{(r)}} \quad (3.72)$$

Remarque 2 : Gradient pour la formulation duale

Dans le cas d'un taux de déformation imposé on a :

$$\frac{\partial F}{\partial \alpha_{(k)}^{(r)}} = \frac{\partial}{\partial \alpha_{(k)}^{(r)}} \left[\tilde{w}_0 + \sum_{r,k} c^r v_{(k)}^{(r)} \left(\alpha_{(k)}^{(r)} \right) \right] \quad (3.73)$$

avec

$$\frac{\partial \tilde{w}_0}{\partial \alpha_{(k)}^{(r)}} = - \frac{1}{2} \left(\underline{\underline{\underline{E}}} \otimes \underline{\underline{\underline{E}}} \right) :: \left[\left(\underline{\underline{\underline{M}}}_0 \right)^{-1} : \frac{\partial \underline{\underline{\underline{M}}}_0}{\partial \alpha_{(k)}^{(r)}} : \left(\underline{\underline{\underline{M}}}_0 \right)^{-1} \right] = - \frac{\partial \tilde{u}_0}{\partial \alpha_{(k)}^{(r)}} \quad (3.74)$$

Le gradient est donc identique pour les formulations en contrainte ou en taux de déformation imposé.

Remarque 3 : Calcul du gradient dans le cas simplifié

Lorsque les exposants n sont identiques pour tous les systèmes, on a vu que l'on pouvait se ramener à un problème de minimisation portant sur une variable de moins (§3.3.2). Le calcul du gradient repose alors sur la dérivation de (3.59) et (3.62). Ce qui conduit aux expressions suivantes :

$$\frac{\partial \tilde{u}}{\partial \tilde{\alpha}_{(k)}^{(r)}} = \frac{n+1}{2n} G c^r \left[-\frac{\langle \tau_{(k)}^{(r)2} \rangle}{\tilde{u}_0} + \frac{v_{(k)}^{(r)} \left(\tilde{\alpha}_{(k)}^{(r)} \right)}{\tilde{\alpha}_{(k)}^{(r)} \sum_{r,k} c^r v_{(k)}^{(r)} \left(\tilde{\alpha}_{(k)}^{(r)} \right)} \right] \quad (3.75)$$

et

$$\frac{\partial \tilde{w}}{\partial \tilde{\alpha}_{(k)}^{(r)}} = \frac{n+1}{2n} H c^r \left[-\frac{\langle \tau_{(k)}^{(r)2} \rangle}{\tilde{w}_0} + \frac{v_{(k)}^{(r)} \left(\tilde{\alpha}_{(k)}^{(r)} \right)}{\tilde{\alpha}_{(k)}^{(r)} \sum_{r,k} c^r v_{(k)}^{(r)} \left(\tilde{\alpha}_{(k)}^{(r)} \right)} \right] \quad (3.76)$$

où G est défini en (3.59) et où H est tel que :

$$H = \frac{2n}{n+1} \tilde{w}_0^{\frac{n+1}{2n}} \left(\frac{n+1}{n-1} \sum_{r,k} c^r v_{(k)}^{(r)} \left(\tilde{\alpha}_{(k)}^{(r)} \right) \right)^{\frac{n-1}{2n}} \quad (3.77)$$

3.4.2 Méthode de calcul des seconds moments

Le calcul des seconds moments fait intervenir la dérivée du tenseur des souplesses effectives par rapport au tenseur de souplesse de chaque constituant. Les modèles d'homogénéisation linéaire utilisés dans ce travail sont basés sur la formulation variationnelle de Hashin et Shtrikman. Il est donc particulièrement intéressant de dériver le tenseur de Hashin et Shtrikman par rapport au comportement des phases (qui peuvent être eux-mêmes des comportements effectifs dans le cadre de la démarche à deux transitions d'échelle). On rappelle la forme du tenseur de Hashin et Shtrikman (2.49) :

$$\tilde{\mathbb{M}}^{\text{HS}} = \left[\sum_I c_I \tilde{\mathbb{M}}_{(I)} : \left(\tilde{\mathbb{M}}^* + \tilde{\mathbb{M}}_{(I)} \right)^{-1} \right] : \left[\sum_I c_I \left(\tilde{\mathbb{M}}^* + \tilde{\mathbb{M}}_{(I)} \right)^{-1} \right]^{-1} \quad (3.78)$$

où $\tilde{\mathbb{M}}_{(I)}$ est la souplesse des constituants et $\tilde{\mathbb{M}}^*$ l'inverse du tenseur d'influence de Hill (2.25) relatif au milieu de référence \mathbb{M}^0 , c'est-à-dire tel que :

$$\tilde{\mathbb{M}}^* = \left[\left(\tilde{\mathbb{S}}^{\text{E}} \right)^{-1} - \mathbb{I} \right]^{-1} : \tilde{\mathbb{M}}^0 = \tilde{\mathbb{E}} : \tilde{\mathbb{M}}^0 \quad (3.79)$$

On dérive le tenseur de Hashin et Shtrikman par rapport à $\mathbb{M}^{(s)}$ qui n'est une variable que pour les tenseurs $\tilde{\mathbb{M}}_{(I')}$ et potentiellement $\tilde{\mathbb{M}}^*$ (s étant une orientation de la phase I' pouvant intervenir ou non dans la construction du milieu de référence). En posant :

$$\Theta_{(I)} = \left(\tilde{\mathbb{M}}^* + \tilde{\mathbb{M}}_{(I)} \right)^{-1} \quad \Lambda_{(I)} = \tilde{\mathbb{M}}_{(I)} : \left(\tilde{\mathbb{M}}^* + \tilde{\mathbb{M}}_{(I)} \right)^{-1} \quad , \quad (3.80)$$

il vient :

$$\frac{\partial \tilde{\mathbb{M}}^{\text{HS}}}{\partial \mathbb{M}^{(s)}} = \left\{ \left[c_{I'} \frac{\partial \tilde{\mathbb{M}}_{(I')}}{\partial \mathbb{M}^{(s)}} : \Theta_{(I')} \right] + \left\langle \tilde{\mathbb{M}}_{(I)} : \frac{\partial \Theta_{(I)}}{\partial \mathbb{M}^{(s)}} \right\rangle - \langle \Lambda_{(I)} \rangle : \langle \Theta_{(I)} \rangle^{-1} : \left\langle \frac{\partial \Theta_{(I)}}{\partial \mathbb{M}^{(s)}} \right\rangle \right\} : \langle \Theta_{(I)} \rangle^{-1} \quad (3.81)$$

La dérivée de $\Theta_{(I)}$ dépend de l'appartenance de s à cette phase ou au milieu de référence.

$$\frac{\partial \Theta_{(I)}}{\partial \mathbb{M}^{(s)}} = \begin{cases} 0 & \text{si } s \notin I \text{ et } s \notin \text{milieu de référence} \\ A & \text{si } s \in I \text{ et } s \notin \text{milieu de référence} \\ B & \text{si } s \notin I \text{ et } s \in \text{milieu de référence} \\ A + B & \text{si } s \in I \text{ et } s \in \text{milieu de référence} \end{cases} \quad (3.82)$$

avec :

$$\begin{aligned} A &= - \left(\tilde{\mathbb{M}}^* + \tilde{\mathbb{M}}_{(I)} \right)^{-1} : \frac{\partial \tilde{\mathbb{M}}_{(I)}}{\partial \mathbb{M}^{(s)}} : \left(\tilde{\mathbb{M}}^* + \tilde{\mathbb{M}}_{(I)} \right)^{-1} \\ B &= - \left(\tilde{\mathbb{M}}^* + \tilde{\mathbb{M}}_{(I)} \right)^{-1} : \left[\frac{\partial \tilde{\mathbb{E}}}{\partial \mathbb{M}^0} :: \frac{\partial \tilde{\mathbb{M}}^0}{\partial \mathbb{M}^{(s)}} : \tilde{\mathbb{M}}^0 + \tilde{\mathbb{E}} : \frac{\partial \tilde{\mathbb{M}}^0}{\partial \mathbb{M}^{(s)}} \right] : \left(\tilde{\mathbb{M}}^* + \tilde{\mathbb{M}}_{(I)} \right)^{-1} \end{aligned} \quad (3.83)$$

3.4.2.a Modèle à une transition d'échelle

Pour le modèle auto-cohérent à une transition d'échelle, on a :

$$\tilde{\mathbb{M}}_{(I)} = \mathbb{M}^{(r)} \quad \Theta_{(I)} = \Theta^{(r)} \quad \Lambda_{(I)} = \Lambda^{(r)} \quad \tilde{\mathbb{M}}^0 = \tilde{\mathbb{M}}^{\text{SC}} = \tilde{\mathbb{M}}^{\text{HS}} \quad \tilde{\mathbb{M}}^* = \mathbb{M}^* = \mathbb{E} \left(\tilde{\mathbb{M}}^{\text{SC}} \right) : \tilde{\mathbb{M}}^{\text{SC}} \quad (3.84)$$

De plus, d'après (2.50c), on a la relation (3.85)

$$\left\langle \Theta^{(r)} \right\rangle^{-1} = \tilde{\mathbb{M}}^{\text{SC}} + \mathbb{M}^* \quad (3.85)$$

qui va être utilisée pour modifier le dernier terme de (3.81). En notant \mathfrak{J} le tenseur identité d'ordre huit, on obtient :

$$\begin{aligned} \frac{\partial \tilde{\mathbb{M}}^{\text{SC}}}{\partial \mathbb{M}^{(s)}} &= c^s \mathfrak{J} : \left(\mathbb{M}^* + \mathbb{M}^{(s)} \right)^{-1} : \left(\mathbb{M}^* + \tilde{\mathbb{M}}^{\text{SC}} \right) + \left\langle \mathbb{M}^{(r)} : \frac{\partial \left(\mathbb{M}^* + \mathbb{M}^{(r)} \right)^{-1}}{\partial \mathbb{M}^{(s)}} \right\rangle : \left(\mathbb{M}^* + \tilde{\mathbb{M}}^{\text{SC}} \right) \\ &\quad + \left\langle \mathbb{M}^{(r)} : \left(\mathbb{M}^* + \mathbb{M}^{(r)} \right)^{-1} \right\rangle : \frac{\partial \left(\mathbb{M}^* + \tilde{\mathbb{M}}^{\text{SC}} \right)}{\partial \mathbb{M}^{(s)}} \\ \frac{\partial \tilde{\mathbb{M}}^{\text{SC}}}{\partial \mathbb{M}^{(s)}} &= c^s \left[\mathfrak{J} - \mathbb{M}^{(s)} : \left(\mathbb{M}^* + \mathbb{M}^{(s)} \right)^{-1} : \mathfrak{J} \right] : \left(\mathbb{M}^* + \mathbb{M}^{(s)} \right)^{-1} : \left(\mathbb{M}^* + \tilde{\mathbb{M}}^{\text{SC}} \right) \\ &\quad + \left\langle \mathbb{M}^{(r)} : \left(\mathbb{M}^* + \mathbb{M}^{(r)} \right)^{-1} \right\rangle : \frac{\partial \tilde{\mathbb{M}}^{\text{SC}}}{\partial \mathbb{M}^{(s)}} \\ &\quad + \left\langle \mathbb{M}^{(r)} : \left(\mathbb{M}^* + \mathbb{M}^{(r)} \right)^{-1} : \frac{\partial \mathbb{M}^*}{\partial \mathbb{M}^{(s)}} : \left[\mathbb{I} - \left(\mathbb{M}^* + \mathbb{M}^{(r)} \right)^{-1} : \left(\mathbb{M}^* + \tilde{\mathbb{M}}^{\text{SC}} \right) \right] \right\rangle \end{aligned} \quad (3.86)$$

En remarquant que $\mathbb{B}^{(r)} = \left(\mathbb{M}^* + \mathbb{M}^{(r)} \right)^{-1} : \left(\mathbb{M}^* + \tilde{\mathbb{M}}^{\text{SC}} \right)$, on réécrit l'égalité précédente :

$$\frac{\partial \tilde{\mathbb{M}}^{\text{SC}}}{\partial \mathbb{M}^{(s)}} = c^s \left[\mathbb{I} - \Lambda^{(s)} \right] : \mathfrak{J} : \mathbb{B}^{(s)} + \left\langle \Lambda^{(r)} : \left(\frac{\partial \tilde{\mathbb{M}}^{\text{SC}}}{\partial \mathbb{M}^{(s)}} + \frac{\partial \mathbb{M}^*}{\partial \mathbb{M}^{(s)}} : \left[\mathbb{I} - \mathbb{B}^{(r)} \right] \right) \right\rangle \quad (3.87)$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial \tilde{\mathbb{M}}^{\text{SC}}}{\partial \mathbb{M}^{(s)}} - \sum_r c^r \Lambda^{(r)} : \left(\frac{\partial \tilde{\mathbb{M}}^{\text{SC}}}{\partial \mathbb{M}^{(s)}} + \left[\frac{\partial \mathbb{E}}{\partial \tilde{\mathbb{M}}^{\text{SC}}} :: \frac{\partial \tilde{\mathbb{M}}^{\text{SC}}}{\partial \mathbb{M}^{(s)}} : \tilde{\mathbb{M}}^{\text{SC}} + \mathbb{E} : \frac{\partial \tilde{\mathbb{M}}^{\text{SC}}}{\partial \mathbb{M}^{(s)}} \right] : \left[\mathbb{I} - \mathbb{B}^{(r)} \right] \right) \\ = c^s \left[\mathbb{I} - \Lambda^{(s)} \right] : \mathfrak{J} : \mathbb{B}^{(s)} \end{aligned} \quad (3.88)$$

Pour simplifier l'expression précédente, il faut passer en notation indicielle¹⁵. Comme les tenseurs d'ordre deux manipulés sont symétriques et de trace nulle, on peut utiliser la notation de Lequeu¹⁶ [109] présentée en §2.2.1.

$$\begin{aligned} \frac{\partial \tilde{M}_{\text{AD}}^{\text{SC}}}{\partial M_{\text{BC}}^{(s)}} - \sum_r c^r \Lambda_{\text{AE}}^{(r)} \cdot \left(\frac{\partial \tilde{M}_{\text{ED}}^{\text{SC}}}{\partial M_{\text{BC}}^{(s)}} + \left[\frac{\partial E_{\text{EF}}}{\partial \tilde{M}_{\text{GH}}^{\text{SC}}} \frac{\partial \tilde{M}_{\text{GH}}^{\text{SC}}}{\partial M_{\text{BC}}^{(s)}} : \tilde{M}_{\text{FI}}^{\text{SC}} + E_{\text{EF}} : \frac{\partial \tilde{M}_{\text{FI}}^{\text{SC}}}{\partial M_{\text{BC}}^{(s)}} \right] : \left[\delta_{\text{ID}} - B_{\text{ID}}^{(r)} \right] \right) \\ = c^s \left[\delta_{\text{AE}} - \Lambda_{\text{AE}}^{(s)} \right] : \mathfrak{J}_{\text{EBCF}} : B_{\text{FD}}^{(s)} \end{aligned} \quad (3.89)$$

On peut, avec cette notation, factoriser les termes $\frac{\partial \tilde{M}^{\text{SC}}}{\partial M^{(s)}}$. En considérant également l'identité $\frac{\partial M_{\text{AD}}^{(r)}}{\partial M_{\text{BC}}^{(r)}} = \mathfrak{J}_{\text{ABCD}} = \delta_{\text{AB}} \delta_{\text{CD}}$, on obtient :

$$\begin{aligned} \left\{ \left(\delta_{\text{AM}} \delta_{\text{DP}} \delta_{\text{BN}} \delta_{\text{CO}} \right) - \sum_r c^r \Lambda_{\text{AE}}^{(r)} \left(\delta_{\text{EM}} \delta_{\text{DP}} \delta_{\text{BN}} \delta_{\text{CO}} + \left[\frac{\partial E_{\text{EF}}}{\partial \tilde{M}_{\text{GH}}^{\text{SC}}} \delta_{\text{GM}} \delta_{\text{HP}} \delta_{\text{BN}} \delta_{\text{CO}} \cdot \tilde{M}_{\text{FI}}^{\text{SC}} + E_{\text{EF}} \cdot \delta_{\text{FM}} \delta_{\text{IP}} \delta_{\text{BN}} \delta_{\text{CO}} \right] \right. \right. \\ \left. \left. : \left[\delta_{\text{ID}} - B_{\text{ID}}^{(r)} \right] \right) \right\} \cdot \frac{\partial \tilde{M}_{\text{MP}}^{\text{SC}}}{\partial M_{\text{NO}}^{(s)}} = c^s \left[\delta_{\text{AE}} - \Lambda_{\text{AE}}^{(s)} \right] \cdot \delta_{\text{EB}} \delta_{\text{CF}} \cdot B_{\text{FD}}^{(s)} \end{aligned} \quad (3.90)$$

¹⁵ Il faut être prudent lors de l'écriture des dérivées composées et vérifier à quel terme se rapportent les différents produits contractés, par exemple : $\frac{\partial}{\partial M_{\text{CD}}} (S_{\text{AM}}(\mathbb{M}') : T_{\text{MB}}) = \frac{\partial S_{\text{AM}}}{\partial M_{\text{NO}}} :: \frac{\partial M_{\text{NO}}}{\partial M_{\text{CD}}} : T_{\text{MB}} + S_{\text{AM}} : \frac{\partial T_{\text{MB}}}{\partial M_{\text{CD}}}$.

¹⁶ On écrit donc les tenseurs d'ordre 4 sous la forme de matrice 5×5 , nous utiliserons des indices majuscules pour signaler l'emploi de cette convention.

ce qui se simplifie en (3.91), du fait de la présence de $\delta_{BN}\delta_{CO}$ dans tous les termes du premier membre.

$$\left\{ \delta_{AM}\delta_{DP} - \sum_r c^r \Lambda_{AE}^{(r)} \left(\delta_{EM}\delta_{DP} + \left[\frac{\partial E_{EF}}{\partial \widetilde{M}_{MP}^{SC}} \cdot \widetilde{M}_{FI}^{SC} + E_{EM} \cdot \delta_{IP} \right] \cdot \left[\delta_{ID} - B_{ID}^{(r)} \right] \right) \right\} \cdot \frac{\partial \widetilde{M}_{MP}^{SC}}{\partial M_{NO}^{(s)}} = c^s \left[\delta_{AN} - \Lambda_{AN}^{(s)} \right] \cdot B_{OD}^{(s)} \quad (3.91)$$

Cette dernière expression est la forme présentée dans [26]. On remarquera que les indices N et O peuvent être interprétés comme des paramètres de la résolution, on se ramène alors à $5 \times 5 = 25$ problèmes linéaires sous forme matricielle et on peut donc utiliser une méthode de résolution classique (décomposition LU par exemple) pour obtenir le terme $\partial \widetilde{M}^{SC} / \partial M^{(s)}$ recherché.

Remarques :

- Les tenseurs apparaissant dans ce calcul présentent tous la symétrie mineure, ce qui justifie l'écriture sous forme de tenseurs 5×5 (l'incompressibilité étant prise en compte dans la notation de Lequeu). Par contre ceux-ci ne respectent pas tous la symétrie majeure, ce qui nous empêche de nous restreindre à un espace de représentation plus petit. Malgré tout, le tenseur identité provenant de la dérivation de deux tenseurs symétriques incompressibles doit avoir la forme $\partial M_{AD}^{(r)} / \partial M_{BC}^{(r)} = 1/2 (\delta_{AB}\delta_{CD} + \delta_{SC}\delta_{BD})$, cette substitution dans les relations précédentes change l'expression de la dérivée mais pas celle des seconds moments obtenus.
- Une fois les $\partial \widetilde{M}^{SC} / \partial M^{(s)}$ calculés, les seconds moments deviennent accessibles directement par (3.69). Dans le cadre de l'implémentation présentée dans la suite du travail, le calcul de la dérivée de \mathbb{E} a été réalisé en utilisant les routines développées par Brenner, Castelnau et Badea dans le cadre de leur article [26]. Le lecteur intéressé par plus de détails sur ce type de traitement est renvoyé à cette référence ainsi qu'au chapitre 3 et aux annexes de la thèse de Nebozhyn [135].

3.4.2.b Modèles à deux transitions d'échelle

Les modèles à deux transitions d'échelle introduits en §3.1.3 se basent sur la résolution précédente pour déterminer la dérivée du tenseur effectif au sein de chacune des phases, puis utilisent une autre formule pour obtenir la dérivée du comportement effectif du mélange de phases en considérant la composition des dérivations.

Dans le cas où le modèle à deux transitions d'échelle est lié à une formulation auto-cohérente à l'échelle des familles d'orientations et à une borne de Voigt (2V) ou de Reuss (2R) à l'échelle de l'assemblage de phases, on obtient simplement les relations (3.92) et (3.93) où I' désigne toujours la phase à laquelle appartient s .

$$\widetilde{M}^{2V} = \left[\sum_I c_I \left(\widetilde{M}_I^{SC} \right)^{-1} \right]^{-1} \quad \frac{\partial \widetilde{M}^{2V}}{\partial M^{(s)}} = c_{I'} \widetilde{M}^{2V} : \left(\widetilde{M}^{SC} \right)^{-1} : \frac{\partial \widetilde{M}_{I'}^{SC}}{\partial M^{(s)}} : \left(\widetilde{M}^{SC} \right)^{-1} : \widetilde{M}^{2V} \quad (3.92)$$

$$\widetilde{M}^{2R} = \sum_I c_I \widetilde{M}_I^{SC} \quad \frac{\partial \widetilde{M}^{2R}}{\partial M^{(s)}} = c_{I'} \frac{\partial \widetilde{M}_{I'}^{SC}}{\partial M^{(s)}} \quad (3.93)$$

Dans le cas où on utilise une formulation de type W/HS+ ou W/HS- il suffit de reprendre l'expression (3.81) dans laquelle on substitue :

$$\widetilde{M}_I = \widetilde{M}_I^{SC} \quad \widetilde{M}^* = \widetilde{E} \left(\widetilde{M}_{dure}^{SC} \right) : \widetilde{M}_{dure}^{SC} \quad \text{pour le modèle W/HS+} \quad (3.94)$$

$$\widetilde{M}_I = \widetilde{M}_I^{SC} \quad \widetilde{M}^* = \widetilde{E} \left(\widetilde{M}_{molle}^{SC} \right) : \widetilde{M}_{molle}^{SC} \quad \text{pour le modèle W/HS-} \quad (3.95)$$

Les formules quasi-analytiques décrites précédemment se sont avérées très utiles aussi bien pour les formulations à une qu'à deux transitions d'échelle car, pour ce type d'application, les méthodes de différences finies atteignent leurs limites, que ce soit en termes de précision ou de vitesse de calcul (les calculs sont réalisés ici à partir de 2000 orientations différentes également réparties entre les phases). Malgré tout, la complexité des expressions obtenues nous a conduit à vérifier systématiquement, par différences finies la

cohérence de nos résultats numériques, afin d'éviter au maximum les risques d'erreur d'implémentation. Il est à noter que l'emploi d'un algorithme de minimisation constitue également une vérification concernant l'implémentation de ces équations. En effet les erreurs de programmation conduisent, en général, à la divergence de l'algorithme.

3.5 Evolution microstructurale

La modélisation précédente, décrivant le comportement instantané du matériau, nous permet d'avoir accès à quelques informations statistiques caractérisant les champs de contrainte et de taux de déformation, ainsi qu'au comportement effectif, en utilisant les résultats de la théorie de l'homogénéisation présentée brièvement au chapitre 2. Les informations sur les champs locaux ainsi obtenues doivent permettre de faire évoluer les caractéristiques microstructurales durant la sollicitation.

Le modèle prend en compte jusqu'à présent la mise à jour de trois caractéristiques du polycristal évoluant au cours de la sollicitation : l'écrouissage intracristallin, la texture cristallographique et la texture morphologique. Nous ne nous intéresserons ici qu'aux deux derniers phénomènes, le traitement de l'écrouissage étant, pour sa part, détaillé au chapitre 6.

3.5.1 Texture cristallographique

La texture cristallographique évolue du fait de la rotation des axes cristallographiques des grains pendant la mise en forme. Cette rotation est due à une rotation de corps rigide macroscopique $\underline{\underline{\Omega}}$ (qui sera supposée nulle ici), à une rotation liée aux interactions avec le milieu entourant la famille d'orientations. Celle-ci sera assimilée à la rotation d'une inclusion fictive noyée dans un milieu homogène, dans une approche de type Hashin et Shtrikman et à une rotation correspondant à la déformation plastique propre de la famille d'orientations. Ces différentes composantes induisent une rotation moyenne des familles d'orientations et sont représentées schématiquement à la figure 3.5. Ce que nous recherchons, au final,

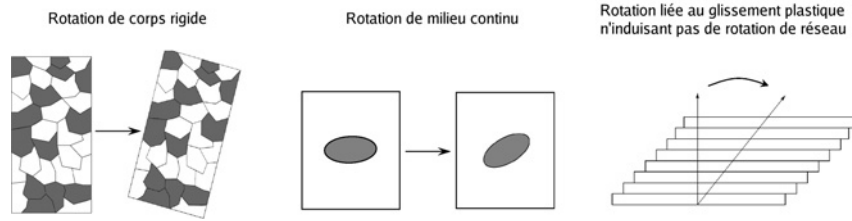


FIG. 3.5: Description schématique des composantes de la rotation des familles d'orientations dans le matériau.

c'est l'orientation du repère cristallographique par rapport au repère macroscopique de l'échantillon. Pour ce faire nous allons préciser les deux composantes de rotation considérées :

Rotation locale du milieu continu : $\hat{\underline{\underline{\omega}}}^{(r)}$ donne à partir des relations de localisation la rotation moyenne des familles d'orientations r dans le repère lié à l'échantillon.

$$\hat{\underline{\underline{\omega}}}^{(r)} = \underline{\underline{\omega}}_{\text{phase/spécimen}} \quad (3.96)$$

En effet, nous avons vu en §2.1.2.b qu'un tenseur \mathbb{P}^0 existait permettant de lier $\underline{\underline{\dot{\epsilon}}}$ à $\underline{\underline{\dot{E}}}$ le même type de relation existe pour la partie antisymétrique du gradient des vitesses¹⁷. On a ainsi :

$$\underline{\underline{\omega}} = \underline{\underline{\Omega}} - \mathbb{R}^0 : (\underline{\underline{\dot{\epsilon}}} - \underline{\underline{\dot{E}}}) \quad (3.97)$$

Ainsi, dans le cadre d'un problème d'inclusion fictif¹⁸ et en utilisant les relations obtenues précé-

¹⁷ Les équations intégrales à l'origine de ces relations portent, à la base, sur le gradient des vitesses.

¹⁸ Cette relation est donc de validité générale pour tous les modèles dérivant de la formulation variationnelle de Hashin et Shtrikman.

demment pour les taux de déformation, on obtient :

$$\underline{\underline{\omega}}^{(r)} = \underline{\underline{\Omega}} - \mathbb{R}^0 : (\mathbb{P}^0)^{-1} : [\underline{\underline{\dot{E}}} - \underline{\underline{\dot{E}}}^{(r)}] \quad (3.98a)$$

$$= \underline{\underline{\Omega}} - \mathbb{R}^0 : (\mathbb{P}^0)^{-1} : [\mathbb{I} - \mathbb{A}^{(r)}] : \underline{\underline{\dot{E}}} \quad (3.98b)$$

cette rotation $\underline{\underline{\omega}}^{(r)}$, désignée ici par le symbole $\underline{\underline{\hat{\omega}}}^{(r)}$, décrit donc la rotation moyenne de la famille d'orientations du fait de son environnement.

Il est à noter que, dans un modèle à deux échelles, cette rotation de milieu continu doit intégrer une rotation à l'échelle des phases et une rotation à l'échelle des familles d'orientations. On a ainsi en reprenant les conventions d'écriture du §3.2.2 pour une orientation r de la phase I :

$$\underline{\underline{\hat{\Omega}}}_{\varphi_I} = \underline{\underline{\hat{\Omega}}} - [\mathbb{R}^0 (\mathbb{P}^0)^{-1}]_{\phi} : [\underline{\underline{\hat{E}}} - \underline{\underline{\hat{E}}}_{\varphi_I}] \quad (3.99a)$$

$$\underline{\underline{\hat{\omega}}}^{(r)} = \underline{\underline{\hat{\Omega}}}_{\varphi_I} - [\mathbb{R}^0 (\mathbb{P}^0)^{-1}]_{|\varphi_I}^G : [\underline{\underline{\hat{E}}}_{\varphi_I} - \underline{\underline{\hat{E}}}^{(r)}] \quad (3.99b)$$

$$\underline{\underline{\hat{\omega}}}^{(r)} = \underline{\underline{\hat{\Omega}}} - [\mathbb{R}^0 (\mathbb{P}^0)^{-1}]_{\phi} : [\underline{\underline{\hat{E}}} - \underline{\underline{\hat{E}}}_{\varphi_I}] - [\mathbb{R}^0 (\mathbb{P}^0)^{-1}]_{|\varphi_I}^G : [\underline{\underline{\hat{E}}}_{\varphi_I} - \underline{\underline{\hat{E}}}^{(r)}] \quad (3.99c)$$

où $[\mathbb{R}^0 (\mathbb{P}^0)^{-1}]_{\phi}$ et $[\mathbb{R}^0 (\mathbb{P}^0)^{-1}]_{|\varphi_I}^G$ sont liés (en utilisant les mêmes notations qu'en (3.12)) respectivement à l'assemblage de phases pour un comportement de référence lié au type de modèle considéré (W/HS±, 2V, 2R...) et à l'assemblage des familles d'orientations pour un milieu de référence égal au module effectif auto-cohérent de la phase I considérée.

Notons également que pour les modèles faisant intervenir les formulations de Voigt et Reuss (V, R, 2V, 2R), cette contribution de la rotation sera considérée nulle par convention¹⁹ ($\underline{\underline{\hat{\omega}}}^{(r)} = \underline{\underline{\hat{\Omega}}}$ pour V et R et $\underline{\underline{\hat{\Omega}}}_{\varphi_I} = \underline{\underline{\hat{\Omega}}}$ pour 2V et 2R).

Rotation plastique : $\underline{\underline{\omega}}_{\text{pl}}^{(r)}$ donne dans le repère lié à la cristallographie, la partie antisymétrique (rotation) de la transformation plastique.

$$\underline{\underline{\omega}}_{\text{pl}}^{(r)} = \sum_i \dot{\gamma}_i^{(r)} \underline{\underline{w}}_i^{(r)} = \underline{\underline{\omega}}_{\text{phase/cristallo}}. \quad (3.100)$$

On en déduit donc l'incrément de rotation du repère cristallographique par rapport au repère lié à l'échantillon $\underline{\underline{\omega}}^{(r)}$, par composition, suivant :

$$\underline{\underline{\omega}}^{(r)} = \underline{\underline{\hat{\omega}}}^{(r)} - \underline{\underline{\omega}}_{\text{pl}}^{(r)} \quad (\text{soit } \underline{\underline{\omega}}_{\text{cristallo./spécimen}} = \underline{\underline{\omega}}_{\text{phase/spécimen}} - \underline{\underline{\omega}}_{\text{phase/cristallo}}.) \quad (3.101)$$

En effet, une partie de la rotation de milieu continu est liée par la rotation plastique qui induit une rotation de milieu continu de la famille d'orientations, mais qui ne contribue pas à l'évolution du repère cristallin. Une fois cet incrément de rotation connu, il faut mettre à jour la matrice de rotation $\underline{\underline{Q}}$ indiquant la position angulaire du repère cristallin par rapport au repère de l'échantillon, la connaissance de toutes ces matrices de rotation constituant la texture cristallographique du matériau. Pour obtenir la nouvelle matrice, on utilise la composition des rotations :

$$\underline{\underline{Q}}(t + \Delta t) = \underline{\underline{\Delta Q}} \underline{\underline{Q}}(t) \quad (3.102)$$

où $\underline{\underline{\Delta Q}}$ est la contribution du taux de rotation au cours d'un pas de temps. La matrice taux de rotation instantané $\underline{\underline{\omega}}^{(r)}$ est antisymétrique et s'interprète donc comme un produit vectoriel avec le pseudo-vecteur rotation instantané $\underline{\underline{\omega}}^{(r)}$, avec $\|\underline{\underline{\omega}}^{(r)}\| = \dot{\theta}^{(r)}$ et $\frac{\underline{\underline{\omega}}^{(r)}}{\dot{\theta}^{(r)}} = \underline{\underline{n}}$ définissant l'axe de rotation instantané. La matrice $\underline{\underline{\Delta Q}}$ se déduit alors par la formule de Rodrigues [97, 41, 117, 107] :

$$\underline{\underline{R}}_{\theta, \underline{\underline{n}}} = \underline{\underline{I}} + \sin(\theta) \underline{\underline{n}} \times + [1 - \cos(\theta)] (\underline{\underline{n}} \times)^2 \quad (3.103)$$

¹⁹Si cette convention est cohérente avec l'hypothèse de cinématique homogène de Voigt, il ne s'agit réellement que d'une hypothèse dans le cadre de Reuss.

avec

$$\underline{\underline{n}} \times = \frac{\underline{\underline{\omega}}^{(r)}}{\underline{\underline{\dot{\theta}}}^{(r)}} \times = \begin{pmatrix} 0 & -n_z & n_y \\ n_z & 0 & -n_x \\ -n_y & n_x & 0 \end{pmatrix} \quad (3.104)$$

d'où l'expression au final de l'incrément de rotation :

$$\underline{\underline{\Delta Q}} = \underline{\underline{I}} + \frac{1}{\underline{\underline{\dot{\theta}}}} \left(\sin(\Delta\theta) \underline{\underline{I}} + \frac{1 - \cos(\Delta\theta)}{\underline{\underline{\dot{\theta}}}} \underline{\underline{\omega}}^{(r)} \right) \underline{\underline{\omega}}^{(r)} \quad (3.105)$$

avec

$$\dot{\theta} = \sqrt{\left(\omega_{32}^{(r)}\right)^2 + \left(\omega_{13}^{(r)}\right)^2 + \left(\omega_{21}^{(r)}\right)^2} \quad \text{et} \quad \Delta\theta = \dot{\theta} \Delta t \quad (3.106)$$

L'évolution d'orientation proposée ici et utilisée dans la suite est univoque pour toute famille d'orientations et obtenue à partir de rotations moyennes sur ces familles.

Cette réorientation pourrait se faire en intégrant les fluctuations des champs mécaniques connues grâce aux seconds moments en faisant, par exemple, une hypothèse de distribution gaussienne des fluctuations. En tirant aléatoirement plusieurs taux de rotation, on obtiendrait plusieurs orientations finales pour une même orientation initiale. Cette procédure conduirait certainement à une évolution différente de la texture cristallographique. Les modèles de mise à jour produisant en général des textures trop marquées, cette méthode pourrait donc améliorer l'adéquation avec les mesures expérimentales. Mais cette technique conduit à une augmentation exponentielle du nombre de familles d'orientations cristallines. Afin d'éviter cette difficulté, un algorithme de rééchantillonnage tel VFT (Volume Fraction Transfert) présenté dans [104, 97] pourrait être utilisé.

3.5.2 Texture morphologique

L'évolution de la "forme" de la répartition statistique des familles d'orientations cristallines ou des domaines de phase est liée à l'évolution des fonctions de corrélation à deux points d'appui. Les fonctions de corrélation sont de plus supposées vérifier la symétrie ellipsoïdale (2.28) introduite par Willis [210], qui a déjà été évoquée à plusieurs reprises dans ce texte et qui permet formellement de se ramener à un problème d'inclusion ellipsoïdale fictive et d'utiliser les résultats d'Eshelby. La question qui se pose est de savoir comment vont évoluer ces fonctions de corrélation au cours d'une grande transformation. La difficulté d'une telle question est liée au fait qu'imposer des évolutions différentes aux fonctions de corrélation peut conduire à des "non conformités" (superposition de phases, trous...) de représentation de la microstructure [157].

3.5.2.a Evolution homogène dans le cas à une transition d'échelle

Une solution simple pour éviter les problèmes de non conformité est de faire évoluer de la même façon la symétrie de toutes les fonctions caractéristiques [156, 157, 117]. Il faut alors se baser sur le gradient macroscopique de la transformation pour que la transformation moyenne au sein du matériau soit bien cohérente avec la transformation imposée (c'est la condition d'admissibilité cinématique). Cette description permet d'assurer la cohésion du matériau, nous considérerons donc une évolution morphologique similaire à celle qui apparaîtrait lors d'une transformation affine :

$$\underline{\underline{x}}(t) = \underline{\underline{F}}(t) \cdot \underline{\underline{x}}(0) + \underline{\underline{c}} \quad (3.107)$$

où $\underline{\underline{x}}$ est un point suivi au cours de son mouvement.

L'équation de la surface d'un ellipsoïde, représentatif de la symétrie de la distribution, peut s'écrire suivant (3.108), où $\underline{\underline{Z}}$ est le tenseur microstructural²⁰.

$$\underline{\underline{x}}(t) \cdot (\underline{\underline{Z}}(t)^T \cdot \underline{\underline{Z}}(t)) \cdot \underline{\underline{x}}(t) = \|\underline{\underline{Z}}(t) \cdot \underline{\underline{x}}(t)\| = 1 \quad (3.108)$$

²⁰Nous noterons que, dans le repère principal (3.108) se ramène à : $\frac{x_1^2}{a_1^2} + \frac{x_2^2}{a_2^2} + \frac{x_3^2}{a_3^2} = 1$. Les composantes principales de $\underline{\underline{Z}}$ sont donc les inverses des demi-axes de l'ellipsoïde.

A tout instant la fonction de corrélation à deux points s'écrit sous la forme :

$$C_t^{rs}(\underline{h}) = \left\langle \chi_t^{(r)}(\underline{x}) \chi_t^{(s)}(\underline{x} + \underline{h}) \right\rangle_{\Omega_{\underline{x}}^t} = C^{rs}(\|\underline{Z}(t) \cdot \underline{h}\|) \quad (3.109)$$

où Ω^t désigne la configuration du matériau au temps t et où $\chi_t^{(r)}(\underline{x})$ est la fonction indicatrice de la phase r dans cette configuration. Cette dernière fonction vérifie la propriété suivante :

$$\chi_t^{(r)}(\underline{x}(t)) = \chi_0^{(r)}(\underline{x}(0)) = \chi_0^{(r)}(\underline{F}^{-1}(t) \cdot [\underline{x}(t) - \underline{c}]) \quad (3.110)$$

Nous cherchons à exprimer l'évolution de \underline{Z} au cours du temps, pour cela utilisons les relations précédentes :

$$C_t^{rs}(\underline{h}) = \left\langle \chi_t^{(r)}(\underline{x}) \chi_t^{(s)}(\underline{x} + \underline{h}) \right\rangle_{\Omega_{\underline{x}}^t} \quad (3.111a)$$

$$= \left\langle \chi_0^{(r)}(\underline{F}^{-1}(t) \cdot [\underline{x} - \underline{c}]) \chi_0^{(s)}(\underline{F}^{-1}(t) \cdot [\underline{x} + \underline{h} - \underline{c}]) \right\rangle_{\Omega_{\underline{x}}^t} \quad (3.111b)$$

$$= \left\langle \chi_0^{(r)}(\underline{X}) \chi_0^{(s)}(\underline{X} + \underline{F}^{-1}(t) \cdot \underline{h}) \right\rangle_{\Omega_{\underline{X}}^0} \quad (3.111c)$$

$$= C_0^{rs}(\underline{F}^{-1}(t) \cdot \underline{h}) \quad (3.111d)$$

Ainsi, d'après l'hypothèse de symétrie ellipsoïdale précédente nous obtenons la relation suivante :

$$C^{rs}(\|\underline{Z}(t) \cdot \underline{h}\|) = C^{rs}(\|\underline{Z}(0) \cdot \underline{F}^{-1}(t) \cdot \underline{h}\|) \quad (3.112)$$

L'équation (3.113) vérifie donc cette condition il s'agit donc d'une²¹ loi d'évolution pour \underline{Z} .

$$\underline{Z}(t) = \underline{Z}(0) \cdot \underline{F}^{-1}(t) \quad \text{ou} \quad \underline{Z}^{-1}(t) = \underline{F}(t) \cdot \underline{Z}^{-1}(0) \quad (3.113)$$

On peut toujours considérer qu'il existe un état de référence fictif pour lequel la surface considérée est une sphère (figure 3.6). L'inverse du tenseur $\underline{Z}(0)$ peut donc être associé à une transformation déformant une

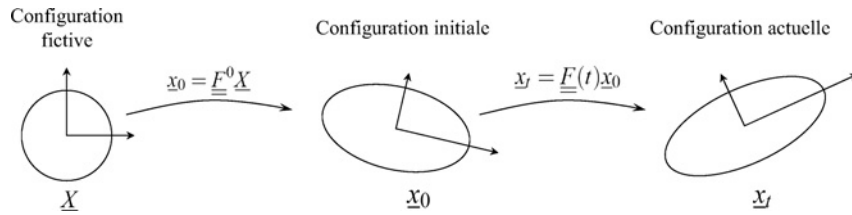


FIG. 3.6: Evolution d'un ellipsoïde soumis à une transformation homogène.

sphère en un ellipsoïde [140], c'est à ce titre qu'initialement 6 composantes (caractérisant la distorsion) sont suffisantes pour définir $\underline{Z}^{-1}(0)$.

Le calcul de l'évolution du tenseur gradient de la transformation est obtenu en utilisant $\dot{\underline{F}} = \underline{L} \cdot \underline{F}$ où $\underline{L} = \underline{\dot{\underline{c}}} + \underline{\omega}$ est le gradient des vitesses macroscopiques. Ainsi, en considérant une formule d'intégration d'Euler, on obtient :

$$\underline{F}(t + \Delta t) = (\underline{I} + \underline{L}(t) \Delta t) \cdot \underline{F}(t) \quad (3.114)$$

ou encore

$$\underline{Z}^{-1}(t + \Delta t) = \underline{Z}^{-1}(t) + \underline{L}(t) \cdot \underline{Z}^{-1}(t) \Delta t \quad (3.115)$$

3.5.2.b Prolongement dans le cas à deux transitions d'échelle

Dans la situation à deux transitions d'échelle, on peut utiliser la même démarche mais l'hypothèse de séparation des échelles nous donne une liberté supplémentaire. En effet, en se plaçant dans le cadre décrit en §3.1.2.a, on peut associer un ellipsoïde différent pour la description de l'agencement des phases et un ellipsoïde pour la description de la répartition des familles d'orientations cristallines dans chaque phase. Ces ellipsoïdes évolueront respectivement avec le gradient de la transformation macroscopique et avec le gradient moyen par phase.

²¹ Il s'agit de la loi d'évolution si C^{rs} est injective et si on impose \underline{Z} d'être à valeurs propres positives.

Remarque concernant l'évolution de la microstructure

L'évolution morphologique qui vient d'être décrite préserve l'intégrité du matériau, ce qui n'est pas assuré, a priori, si l'on fait évoluer de façon quelconque les fonctions de corrélation. Mais le rôle important joué par l'évolution de microstructure, mis en évidence dans la suite, nous conduit à nous intéresser à d'autres possibilités pour mettre à jour la microstructure. Il faut pour cela intégrer des interactions entre les constituants. La littérature sur le sujet est rare, malgré tout Adams, Canova et Molinari [2] ont suggéré une piste d'évolution qui a été développée ensuite dans le cadre des matériaux biphasés [111] et polycristallins [63] en se plaçant dans un contexte de milieu aléatoire et en utilisant des expressions explicites pour les fonctions de corrélation (telles les lois de Corson [34, 35] devant donc vérifier la relation (2.10)).

Leur méthode consiste à faire évoluer les fonctions de corrélation en considérant l'évolution de bipoints liant une phase à une autre, $\underline{y} \in \Omega_{\varphi_I}$ et $\underline{y} + \underline{h} \in \Omega_{\varphi_J}$. L'évolution de ces bipoints étant estimée à l'aide d'expressions intégrales de la forme (2.21). Il est clair qu'une telle évolution de microstructure n'est pas compatible avec un modèle auto-cohérent traditionnel, qui n'accepte qu'une seule forme d'ellipsoïde, car l'évolution serait a priori distincte pour les différents constituants et non ellipsoïdale en général. Dans un tel cadre, il faut donc utiliser un autre mode de résolution basé sur des approches numériques et sans rapport avec les problèmes d'inclusions et la solution d'Eshelby.

Dans la suite, c'est une mise à jour homogène classique, basée sur la transformation macroscopique, qui sera considérée, mais il nous semblait néanmoins important de souligner l'existence de pistes permettant sans doute des améliorations concernant la représentation de l'évolution morphologique.

Conclusion

Cette partie a exposé les difficultés spécifiques liées à la représentation des polycristaux biphasés. Afin de caractériser l'influence de la distribution des phases, ce qui n'est pas possible à l'aide d'un modèle auto-cohérent biphasé, une formulation à deux transitions d'échelle a été introduite (la figure 3.7 résume schématiquement les modélisations introduites dans ce chapitre). Cette formulation peut sembler un peu artificielle dans la mesure où les domaines de phase sont en général de taille comparable à celle des grains. Malgré tout une telle modélisation doit, selon nous, permettre de dégager des tendances en se rapprochant de situations où l'une des phases "englobe" l'autre. C'est à l'aide de ce type de modèle que nous essaierons d'expliquer les observations expérimentales réalisées sur les matériaux austéno-ferritiques. La partie suivante va nous renseigner sur la réponse du modèle dans différentes configurations tests. Nous pourrons ainsi estimer si un effet de répartition des phases peut apparaître à l'aide d'une telle formulation et, le cas échéant, décrire les conditions d'apparition d'un tel phénomène.

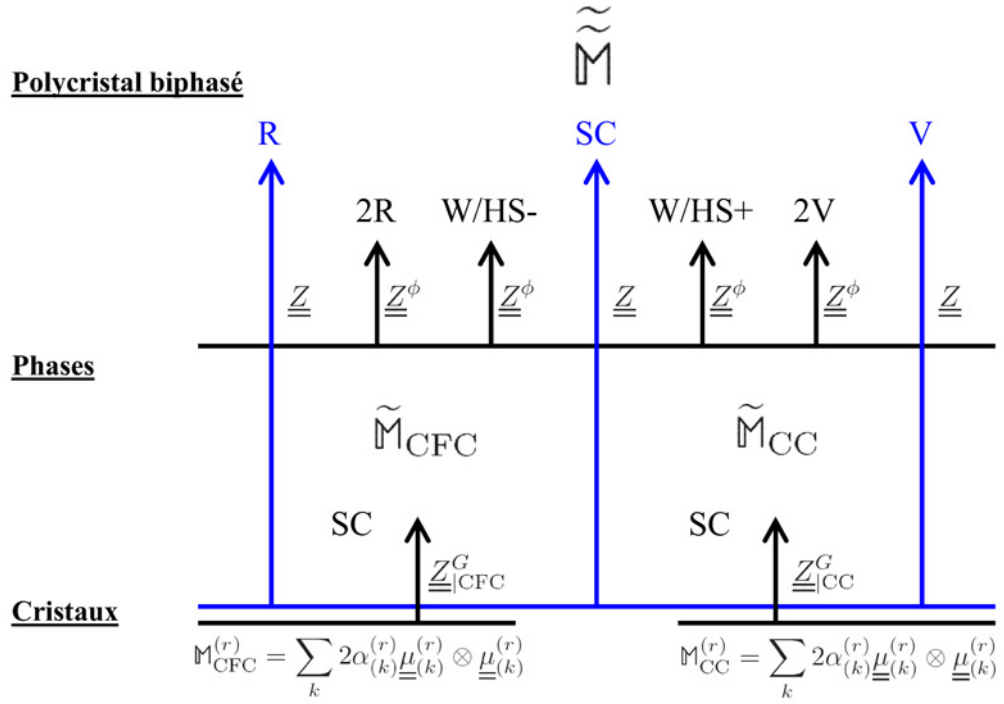


FIG. 3.7: Représentation schématique des modèles introduits dans ce chapitre.

Chapitre 4

Validations et premiers résultats sur des matériaux modèles

Sommaire

4.1	Validation du modèle	97
4.1.1	Comparaisons dans le cas monophasé linéaire	97
4.1.2	Comparaisons dans le cas biphasé linéaire	100
4.1.3	Comparaisons dans le cas monophasé non linéaire	103
4.2	Effets morphologiques dans les polycristaux biphasés non linéaires	105
4.2.1	Caractérisation instantanée	105
4.2.2	Evolution du matériau	114
4.2.3	Influence de la morphologie sur l'évolution mécanique du matériau	118

Introduction

Le chapitre précédent a présenté les descriptions qui seront utilisées dans cette partie pour modéliser le comportement (en loi puissance) de polycristaux biphasés. L'objectif de tels modèles est de caractériser l'influence de la distribution des phases sur la réponse mécanique instantanée du matériau à différentes échelles et sur son évolution au cours du processus de mise en forme. Il est clair que l'influence de la distribution des phases va être liée aux propriétés de chacune d'elles, ainsi qu'aux mécanismes d'évolution de la microstructure. L'objectif de ce chapitre est tout d'abord de réaliser quelques tests et vérifications afin de valider l'implémentation du modèle. On s'appuiera pour cela sur VPSC¹ (version 7) un logiciel de prévision du comportement de polycristaux non linéaires implémenté par Lebensohn et Tomé [103] et sur certaines solutions analytiques pour les polycristaux à texture isotrope.

Nous considérerons ensuite la réponse de nos modèles en fonction de paramètres caractéristiques du matériau tels que la fraction volumique des phases, le contraste interphase, l'exposant des lois puissances représentatif de la non linéarité, l'anisotropie de la distribution des phases ou la texture cristallographique. Ces simulations nous aideront à savoir dans quelles situations la répartition des phases est un paramètre critique pour la description de la réponse du matériau à l'échelle à laquelle on souhaite la caractériser. Dans ce chapitre, le gradient des vitesses² imposé au polycristal est donné par :

$$\underline{\underline{L}} = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & \frac{\sqrt{3}}{2} & 0 \\ 0 & 0 & -\frac{\sqrt{3}}{2} \end{pmatrix} ; \quad L_{eq.} = 1 \quad (4.1)$$

sauf mention explicite d'un autre état de sollicitation (les directions 1, 2 et 3 de la base d'écriture de (4.1) seront appelées respectivement direction transverse, direction de laminage et direction normale). De même, le nombre d'orientations considérées, par défaut, pour chaque phase est de 1000 (celles-ci présentant une texture initiale isotrope). Il est à noter également que, dans ce chapitre, la cission de référence $\tau_{c(k)}^{(r)}$ de tous les systèmes de glissement est fixée, le phénomène d'écrouissage intracristallin sera traité au chapitre 6. On convient que les facteurs $\dot{\gamma}_0$ apparaissant dans l'expression de la loi puissance (2.71) sont unitaires par convention. De plus, nous ferons l'hypothèse que les cissions de référence des deux systèmes de glissement existant dans la structure CC sont identiques, ce qui correspond aux hypothèses communément admises dans le cas de cette structure cristallographique [135].

Avant de commencer cette étude nous allons présenter les tracés qui seront utilisés. Ceux-ci représenteront les équivalents, au sens de von Mises, des tenseurs des contraintes, des taux de déformation ou des déformations logarithmiques moyennés à différentes échelles. Ils prendront la forme de courbes à l'échelle du polycristal ou de ses phases, et la forme de nuages de points à l'échelle des familles d'orientations cristallographiques (un point représentant une famille). Les notations $\sigma_{eq.}$, $\dot{\varepsilon}_{eq.}$ et $\varepsilon_{eq.}$ sur les axes de ces graphes s'interpréteront donc différemment suivant la courbe considérée. Certains tracés d'évolution des champs mécaniques feront intervenir les désignations "initial" et "final" se rapportant, respectivement, au comportement avant toute mise à jour et à la réponse après le dernier incrément de temps (on utilisera en général 40 incréments pour atteindre $E_{eq.}$ pour une durée d'essai unitaire).

Les notations "Sécant", "Tangent", "Affine" et "SO" se rapportent aux méthodes de linéarisation correspondantes (chapitre 2) implémentées dans VPSC et associées au modèle auto-cohérent (aussi désigné par la notation "SC"), alors que les autres notations, déjà introduites en §3.1.3, sont relatives aux modèles utilisés dans VARIPOLY. Ces derniers utilisent tous la méthode de linéarisation variationnelle et diffèrent par la représentation du matériau, c'est-à-dire par le modèle d'homogénéisation linéaire.

Remarque : Intégration du taux de déformation

Le modèle utilisé est un modèle viscoplastique, ses variables mécaniques sont donc des contraintes et des vitesses de déformation. Le passage de ces taux de déformation à la déformation obtenue au cours d'un essai nécessite une intégration. Dans tout ce travail, nous considérerons des déformations logarithmiques

¹Cet acronyme signifie ViscoPlastic Self-Consistent.

²Le taux de déformation associé est noté $\underline{\underline{\dot{E}}}$.

obtenues à partir des expression suivantes :

$$\underline{\underline{F}} = \underline{\underline{R}} \cdot \underline{\underline{U}} \quad (4.2a)$$

$$\underline{\underline{F}}^T \cdot \underline{\underline{F}} = \underline{\underline{U}}^T \cdot \underline{\underline{U}} = \underline{\underline{Q}} \cdot \underline{\underline{D}}^T \cdot \underline{\underline{D}} \cdot \underline{\underline{Q}}^T \quad (4.2b)$$

$$\underline{\underline{\varepsilon}} = \underline{\underline{Q}} \cdot \begin{pmatrix} \ln(D_{11}) & 0 & 0 \\ 0 & \ln(D_{22}) & 0 \\ 0 & 0 & \ln(D_{33}) \end{pmatrix} \cdot \underline{\underline{Q}}^T \quad (4.2c)$$

où (4.2a) traduit une décomposition multiplicative du tenseur gradient de la transformation en rotation et distorsion, et où les tenseurs $\underline{\underline{Q}}$ et $\underline{\underline{D}}$ contiennent respectivement les vecteurs propres et les valeurs propres de $\underline{\underline{U}}$.

Pour la déformation moyenne sur le polycristal soumis à un taux de déformation macroscopique constant, cette formulation s'identifie à l'intégration temporelle, composante par composante, du tenseur taux de déformation. En effet, (2.57), (3.114) et (4.2) conduisent à

$$\underline{\underline{L}} = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & a & 0 \\ 0 & 0 & -a \end{pmatrix} \quad \underline{\underline{F}}(t) = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & (1 + a dt)^N & 0 \\ 0 & 0 & (1 - a dt)^N \end{pmatrix} \quad \underline{\underline{\varepsilon}}(t) = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & at & 0 \\ 0 & 0 & -at \end{pmatrix} \quad (4.3)$$

pour N incréments d'une durée dt soit une durée totale de t , et en considérant adt suffisamment petit pour que $e^{N \ln(1+adt)} \approx e^{Nadt} = e^{at}$. De même, pour les moyennes par phase de la déformation peu de différences ont été observées entre les deux formulations, c'est donc ainsi en pratique que les déformations équivalentes seront calculées (ce qui nous dispense d'une étape de diagonalisation). Par contre, à l'échelle des familles d'orientations des différences plus importantes ont été observées et le calcul des déformations sera donc réalisé à l'aide des expressions (4.2).

4.1 Validation du modèle

Le programme testé et utilisé ici est une implémentation en Fortran du modèle présenté au chapitre précédent. Il enrichit la structure du programme VARIPOLY développé par Gilormini [66].

Afin de valider l'implémentation du modèle variationnel biphasé à une transition d'échelle, nous avons tenté de reproduire les résultats fournis dans le cas de matériaux linéaires par VPSC, car dans ces conditions, la méthode de linéarisation ne doit évidemment pas influencer sur le résultat. Nous avons également comparé les résultats de VARIPOLY en non linéaire avec les différents modèles de linéarisation proposés par le logiciel de Lebensohn et Tomé, ainsi qu'avec des données issues de la littérature.

Des tests et vérifications de cohérence du modèle ont été menés en faisant tendre, par exemple, la fraction volumique d'une des phases vers 0, ou en utilisant des différences finies pour vérifier l'implémentation des formules complexes présentées à la section 3.4.2.

Ce cheminement nous a conduit à traiter le cas linéaire monophasé, le cas linéaire biphasé dans sa formulation auto-cohérente et le cas non linéaire monophasé pour valider l'implémentation. Afin de donner des résultats de référence et de compléter cette étude, les champs locaux dans ces différentes situations seront également présentés bien qu'ils ne puissent pas tous être comparés à des résultats antérieurs.

4.1.1 Comparaisons dans le cas monophasé linéaire

Dans le cas monophasé linéaire, on considère des cisssions de référence unitaires pour les deux phases, ainsi $\tau_c^{\text{CFC}} = \tau_c^{\text{CC}} = 1$, les résultats issus de VARIPOLY et de VPSC sont indiscernables comme en atteste la figure 4.1 présentant l'évolution de la réponse macroscopique dans chacun des polycristaux monophasés. On constate en effet sur cette figure que les différentes linéarisations coïncident exactement, la comparaison des microstructures donne le même résultat. Cette observation nous permet de valider l'implémentation du modèle auto-cohérent linéaire, ainsi que la mise à jour de la microstructure (texture cristallographique et morphologique). En outre, en comparant les graphes, on s'aperçoit que la dépendance de la contrainte vis-à-vis de la cristallographie n'intervient que par le biais d'un facteur multiplicatif ce qui peut se justifier par un calcul direct. En effet, dans le cas simple considéré ici, la résolution peut être menée analytiquement, au moins pour le premier point caractérisé par une texture isotrope. Dans le cas où la raideur est identique pour tous les systèmes d'un grain, celui-ci présente une

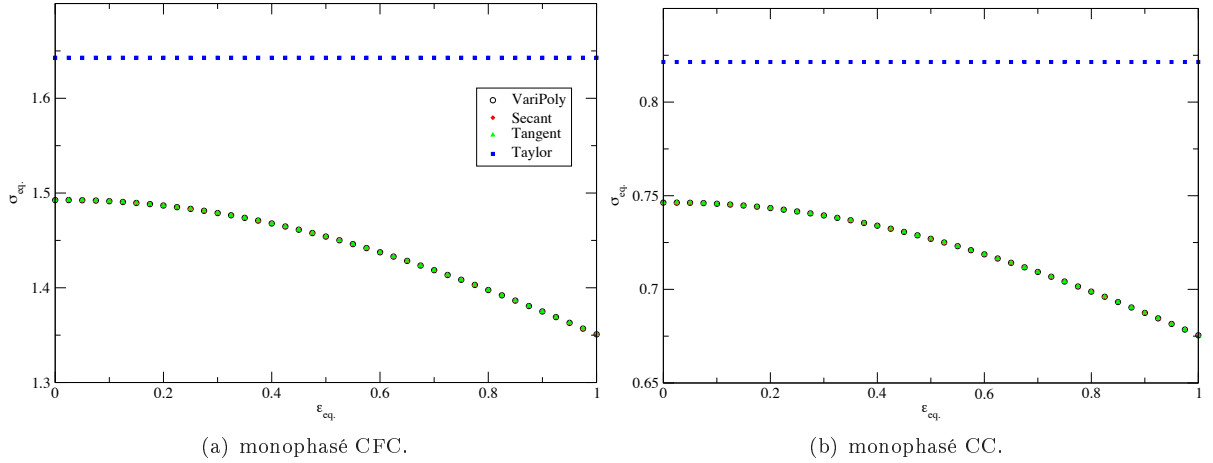


FIG. 4.1: Comportement macroscopique d'un polycristal monophasé linéaire suivant quatre modèles différents.

symétrie de comportement cubique et peut donc se caractériser par deux paramètres (car il demeure incompressible). Les développements relatifs à l'assemblage de constituants linéaires de symétrie cubique et à texture isotrope sont résumés en annexe A, nous nous contenterons ici de donner quelques résultats permettant des comparaisons avec les courbes simulées. Les modules de cisaillement des monocristaux, associés respectivement à la structure CFC et à la structure CC, sont donnés par (4.4).

$$\mu_a^{\text{CFC}} = \frac{\tau_c^{\text{CFC}}}{4\dot{\gamma}_0} \quad \mu_b^{\text{CFC}} = \frac{3\tau_c^{\text{CFC}}}{4\dot{\gamma}_0} \quad (4.4a)$$

$$\mu_a^{\text{CC}} = \frac{1}{4\dot{\gamma}_0 \left(\frac{1}{\tau_c^{\text{CC}_1}} + \frac{1}{\tau_c^{\text{CC}_2}} \right)} \quad \mu_b^{\text{CC}} = \frac{3}{4\dot{\gamma}_0 \left(\frac{1}{\tau_c^{\text{CC}_1}} + \frac{1}{\tau_c^{\text{CC}_2}} \right)} \quad (4.4b)$$

où ces paramètres se rapportent à la partie déviatorique d'un tenseur de symétrie cubique dont la décomposition spectrale est :

$$3k\mathbb{J} + 2\mu_a\mathbb{K}_a + 2\mu_b\mathbb{K}_b \quad (4.5)$$

avec

$$\mathbb{J} = \frac{1}{3}\underline{\underline{i}} \otimes \underline{\underline{i}} \quad \mathbb{K} = \mathbb{I} - \mathbb{J} \quad \Phi = \sum_i \underline{\underline{e}}_i \otimes \underline{\underline{e}}_i \otimes \underline{\underline{e}}_i \otimes \underline{\underline{e}}_i \quad (4.6)$$

$$\mathbb{K}_a = \Phi^{(r)} - \mathbb{J} \quad \mathbb{K}_b = \mathbb{K} - \mathbb{K}_a = \mathbb{I} - \Phi \quad (4.7)$$

et où les $\underline{\underline{e}}_i$ sont alignés suivant les directions $\langle 100 \rangle$ du cristal. Si les polycristaux monophasés CC et CFC ont même microstructure, les relations précédentes et la linéarité imposent que leurs comportements soient liés par le rapport $f = \mu_a^{\text{CFC}}/\mu_a^{\text{CC}} = \mu_b^{\text{CFC}}/\mu_b^{\text{CC}} = \tau_c^{\text{CFC}}(\tau_c^{\text{CC}_1} + \tau_c^{\text{CC}_2})/(\tau_c^{\text{CC}_1}\tau_c^{\text{CC}_2})$ qui vaut 2 dans le cas présent ce qui correspond bien au rapport d'échelles observé sur la figure 4.1. De plus, conformément à l'annexe A les modules effectifs $\tilde{\mu}$ de Voigt et auto-cohérent obtenus pour la structure CFC de texture isotrope valent respectivement $11/20$ et $1/2$, qui sont bien les valeurs obtenues initialement à la figure³ 4.1(a) en considérant $\Sigma_{\text{eq.}} = 3\tilde{\mu}\dot{E}_{\text{eq.}}$, et qui sont également mentionnées dans [82] ou [137] par exemple. Les évolutions de microstructure sont identiques pour les deux types de polycristaux monophasés. Pour expliquer ce phénomène, notons tout d'abord que nous partons de la même microstructure pour les deux polycristaux. Les évolutions de forme des fonctions de corrélation resteront donc identiques, car la procédure de mise à jour se base sur le gradient de la transformation qui est la grandeur imposée dans ces simulations. L'identité d'évolution des textures cristallographiques se justifie, d'une part, en remarquant l'homogénéité respectivement de degré 0 et 1 des tenseurs $\mathbb{R}^0 : (\mathbb{P}^0)^{-1}$ et $\mathbb{A}^{(r)}$ vis-à-vis des modules (§2.2.2.b remarque 1) qui impose une rotation $\hat{\omega}^{(r)} = -\mathbb{R}^0 : (\mathbb{P}^0)^{-1} : [\mathbb{I} - \mathbb{A}^{(r)}] : \underline{\underline{E}}$ (§3.5.1)

³Le léger écart est lié au tirage des orientations, en effet l'utilisation de 10000 orientations au lieu de 1000 nous rapproche de la solution analytique, sans toutefois, nous permettre de l'atteindre.

égale dans les deux cas et, d'autre part, en rappelant une propriété générale des monocristaux cubiques présentant même raideur sur chacun de leurs systèmes. Cette dernière propriété (annexe A) assure la nullité des rotations plastiques dans un tel cas. Ce phénomène peut être clairement mis en évidence dans le cadre du modèle de Taylor, car c'est alors le seul mécanisme d'évolution de microstructure, et on vérifie sur les courbes précédentes que le comportement, et donc la microstructure, n'évoluent pas. Dans le cas auto-cohérent, l'évolution de la microstructure (rotation des familles d'orientations et évolution du tenseur microstructural) est donc uniquement liée à l'évolution de la forme⁴ par l'intermédiaire du tenseur microstructural intervenant dans le calcul du tenseur d'influence de Hill (\mathbb{C}^*) ; on peut remarquer que cette évolution semble jouer un rôle important dans la prévision du comportement.

Les graphes de la figure 4.2 représentent l'hétérogénéité des champs mécaniques dans chaque famille

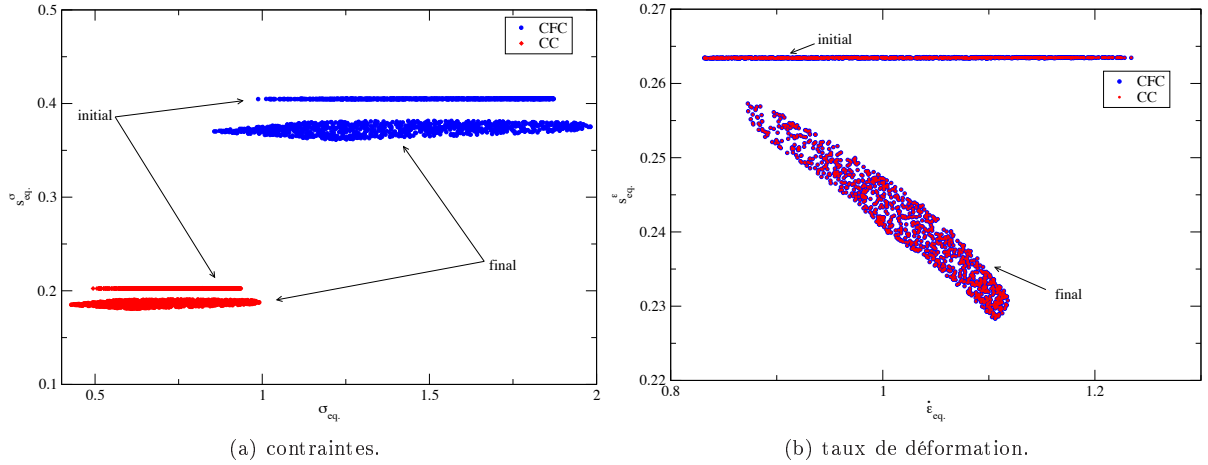


FIG. 4.2: Représentation des hétérogénéités locales pour chaque famille d'orientations pour des polycristaux linéaires monophasés. Les notations s_{eq}^{σ} et s_{eq}^{ε} désignent respectivement l'équivalent de "l'écart-type" des contraintes et des taux de déformation (4.8).

d'orientations. L'ordonnée de ces graphes présente la valeur équivalente de l'écart-type des contraintes et des taux de déformation au sein des familles d'orientations. Ces grandeurs sont définies par les équations (4.8).

$$s_{eq}^{\sigma} = \sqrt{\frac{3}{2} \mathbb{K} :: (\langle \underline{\underline{\sigma}} \otimes \underline{\underline{\sigma}} \rangle - \langle \underline{\underline{\sigma}} \rangle \otimes \langle \underline{\underline{\sigma}} \rangle)} \quad \text{et} \quad s_{eq}^{\varepsilon} = \sqrt{\frac{2}{3} \mathbb{K} :: (\langle \underline{\underline{\dot{\varepsilon}}} \otimes \underline{\underline{\dot{\varepsilon}}} \rangle - \langle \underline{\underline{\dot{\varepsilon}}} \rangle \otimes \langle \underline{\underline{\dot{\varepsilon}}} \rangle)} \quad (4.8)$$

L'amplitude des nuages de points en abscisse quantifie une hétérogénéité inter-orientation ou intraphase, alors que le niveau des points, selon l'axe des ordonnées, décrit une dispersion intra-orientation. Il est remarquable sur la figure 4.2(b) de s'apercevoir que les taux de déformation dans les matériaux sont identiques, cette identité est liée au pilotage en taux de déformation imposé, qui contrôle l'évolution du tenseur microstructural (§3.5.2), et au fait que la cristallographie n'intervient pas dans la mise à jour de la microstructure du fait des raisons invoquées précédemment.

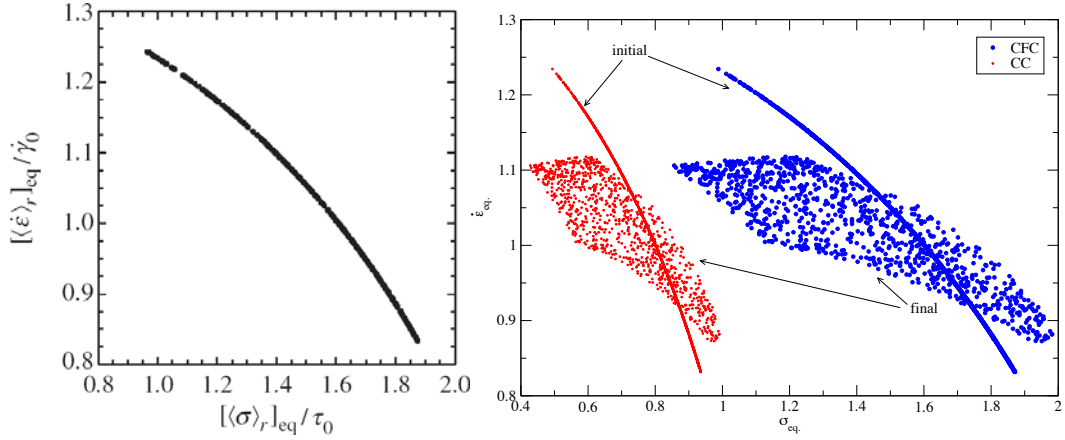
La valeur d'écart-type des contraintes de 0.4 pour le polycristal CFC de la figure 4.2(a) correspond à la valeur trouvée par [26] dans le cas d'une traction uniaxiale. Nous retrouvons également des valeurs en accord avec cet article pour le lien entre contrainte moyenne et vitesse de déformation moyenne par famille d'orientations représenté figure 4.3 ainsi que pour les amplitudes de variation des moyennes des contraintes lorsque l'on balaye l'ensemble des familles d'orientations. Le fait que la traction axisymétrique et la compression plane donnent des résultats identiques est lié à l'indépendance du problème vis-à-vis du troisième invariant dans le cas linéaire.

Au cours de l'évolution du matériau nous pouvons remarquer (figure 4.2) que l'hétérogénéité intra-orientation a tendance à décroître et que, dans le cas de la contrainte, l'amplitude de variation des niveaux moyens a tendance à augmenter légèrement. Pour la vitesse de déformation, on observe que la décroissance des fluctuations intra-orientation est corrélée au taux de déformation moyen pour la famille

⁴Il y a bien une évolution de la texture mais celle-ci ne fait intervenir que le terme $\hat{\omega}$.

d'orientations considérée : les fluctuations au sein d'une famille d'orientations deviendront d'autant plus faibles que celle-ci aura un taux de déformation moyen important.

On remarquera également l'identité des résultats en contrainte entre le matériau CC et le matériau CFC



(a) Cas d'un matériau CFC en traction uni-axiale présenté par [26]. (b) Situation identique mais en compression plane pour un matériau CFC et un matériau CC.

FIG. 4.3: Exemple de confrontation du modèle à un cas linéaire monophasé déjà traité dans la littérature.

au facteur f près, $s_{eq}^\sigma(\text{CFC}) = f s_{eq}^\sigma(\text{CC})$ et $\sigma_{eq}(\text{CFC}) = f \sigma_{eq}(\text{CC})$, ce qui est directement lié à l'identité des évolutions et à la linéarité du comportement.

Si l'un des matériaux voit la raideur de ses systèmes de glissement augmenter uniformément, les champs de contrainte évolueront, en conséquence, de façon linéaire du fait de la linéarité globale du problème. L'évolution microstructurale, quant à elle, restera identique du fait du pilotage en taux de déformation de la simulation, des considérations d'homogénéité introduites précédemment et de la nullité de la rotation plastique.

Les diagrammes homologues de 4.2(a) pour d'autres configurations seront renormalisés en abscisse et en ordonnée par la contrainte macroscopique sur le polycristal, afin de pouvoir comparer des situations où les contraintes macroscopiques sont très différentes.

4.1.2 Comparaisons dans le cas biphasé linéaire

On peut produire des résultats équivalents à ceux de la section précédente dans le cas de polycristaux biphasés à contraste unité ($\tau_c^{\text{CFC}} = \tau_c^{\text{CC}} = 1$), les deux phases présentant même fraction volumique, même microstructure initiale et en décrivant leur assemblage à l'aide d'un modèle auto-cohérent biphasé.

Le comportement macroscopique obtenu est présenté à la figure 4.4(a), les valeurs initiales de contraintes équivalentes étant en accord avec les calculs analytiques réalisés en annexe A dans le cas du modèle de Voigt (99/80) et du modèle auto-cohérent (≈ 1.071). Cette réponse macroscopique est le fruit d'une répartition des contraintes et des taux de déformation entre les deux phases (figure 4.4(b)). Cette partition peut être calculée analytiquement pour le premier point, où des valeurs de contraintes équivalentes de 1.278 et 0.864 sont prévues, respectivement, pour la phase CFC et la phase CC (annexe A).

Comme précédemment, l'hétérogénéité instantanée peut être caractérisée par la moyenne et l'écart-type des contraintes et des vitesses de déformation au sein de chaque famille d'orientations (figure 4.5). Dans ce cas, on s'aperçoit que les taux de déformation sont différents dans chaque phase, ce qui est nouveau par rapport à la figure 4.2(b). Malgré tout des tendances similaires à celles notées dans le cas monophasé sont observées. La figure 4.5 résume également les termes qui seront utilisés dans la suite pour décrire et interpréter ces nuages de points.

Les courbes d'écoulement macroscopiques obtenues à l'aide de VPSC et VARIPOLY sont en très bon accord (figures 4.4(a) et 4.6(a)). Néanmoins, on observe une très légère déviation après plusieurs mises à jour de la microstructure (figure 4.6(a)). Ces différences sont, probablement, à mettre sur le compte de légères différences d'implémentation liées au calcul du tenseur d'Eshelby. Elles semblent d'autant plus

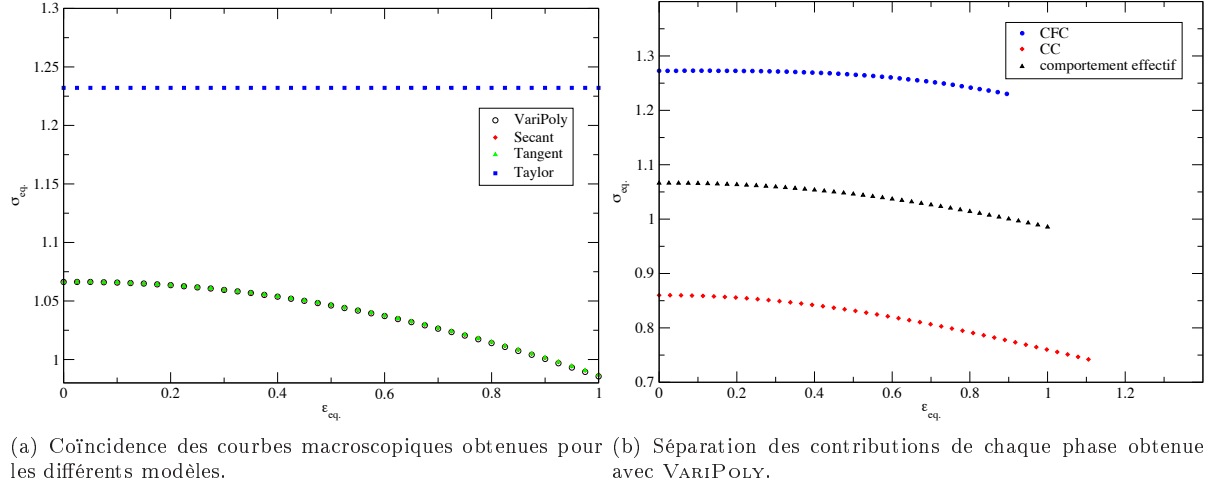


FIG. 4.4: Matériau biphasé (50/50) linéaire de contraste unité.

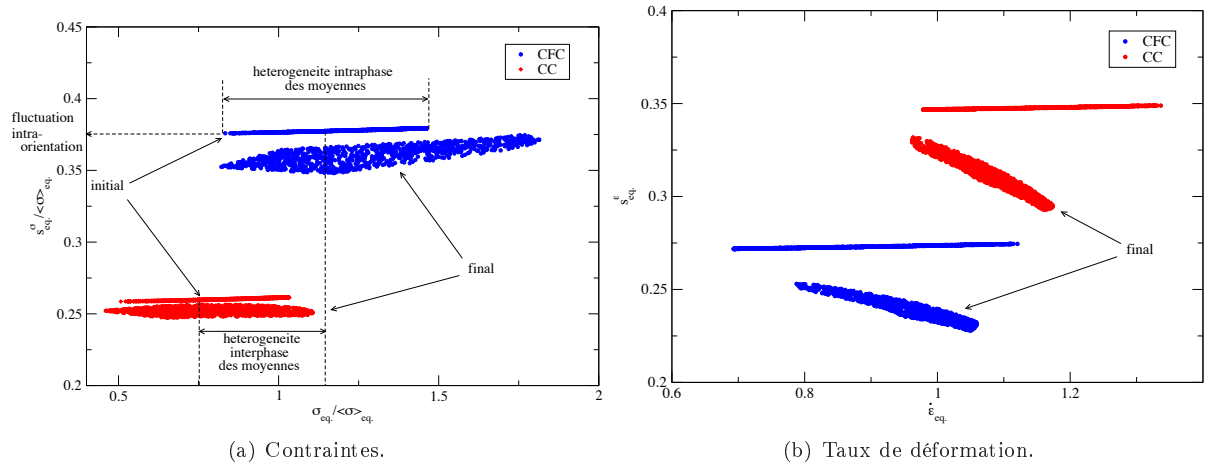


FIG. 4.5: Matériau biphasé (50/50) linéaire de contraste unité : informations statistiques sur les champs mécaniques dans les familles d'orientations.

marquées que le contraste entre les phases $M = \tau_c^{CFC} / \tau_c^{CC}$ augmente (ce contraste est imposé en gardant $\tau_c^{CC} = 1$ et en faisant évoluer τ_c^{CFC} comme ce sera le cas dans toute la suite du chapitre).

On note qu'en présence de contraste la convexité de la courbe de comportement effectif s'inverse : l'évolution de microstructure dans le matériau contrasté tend à durcir la réponse globale alors qu'elle induisait un adoucissement en l'absence de contraste. Ce phénomène semble principalement imputable à la phase dure dont la dureté évolue d'autant plus que sa cission de référence est élevée, le niveau de la phase molle n'évoluant que très peu (figure 4.6(b)). On peut remarquer, en outre sur la figure 4.6, que le taux de déformation dans la phase la plus dure augmente au cours de la sollicitation, ce qui est cohérent avec le durcissement observé. Ce phénomène est dû à une modification de la localisation interphase des taux de déformation qui est associée à une évolution microstructurale.

Les premiers points des graphes de la figure 4.6 ont fait l'objet d'une vérification analytique présentée à la table A.1 de l'annexe A. Cette comparaison permet de valider l'implémentation du modèle d'homogénéisation auto-cohérent biphasé.

Les fluctuations par famille d'orientations sont visibles figure 4.7, information qui vient compléter celle de la figure 4.5 présentée précédemment dans le cas non contrasté. La figure 4.7 montre que les nuages de points relatifs à chacune des phases ont tendance à s'éloigner horizontalement lorsque le contraste augmente, ce qui traduit une hétérogénéité interphase des moyennes croissante. On peut noter également

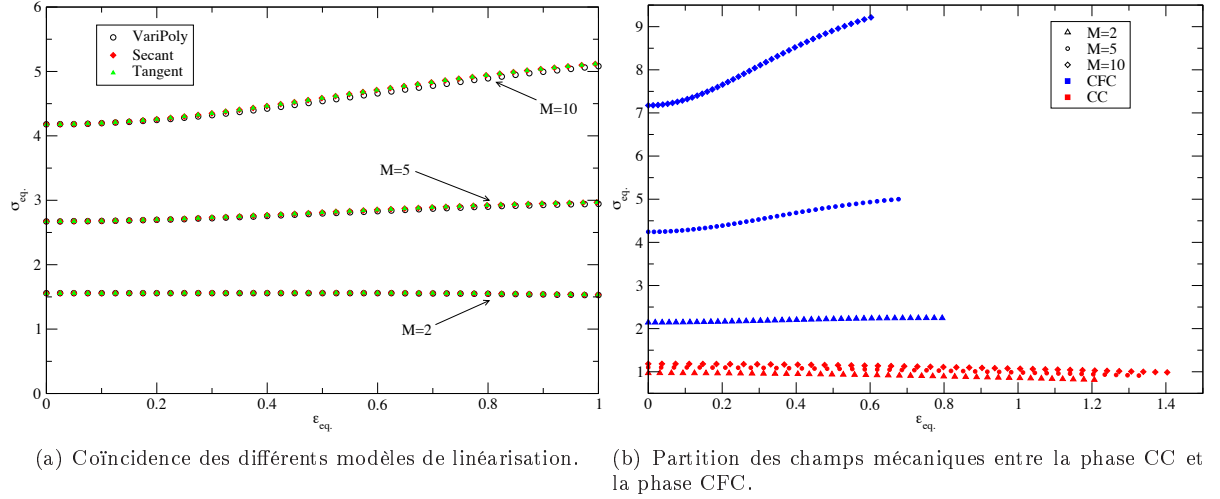


FIG. 4.6: Evolution de la réponse de polycristaux biphasés linéaires pour des valeurs de contraste différentes et même fraction volumique de chaque phase.

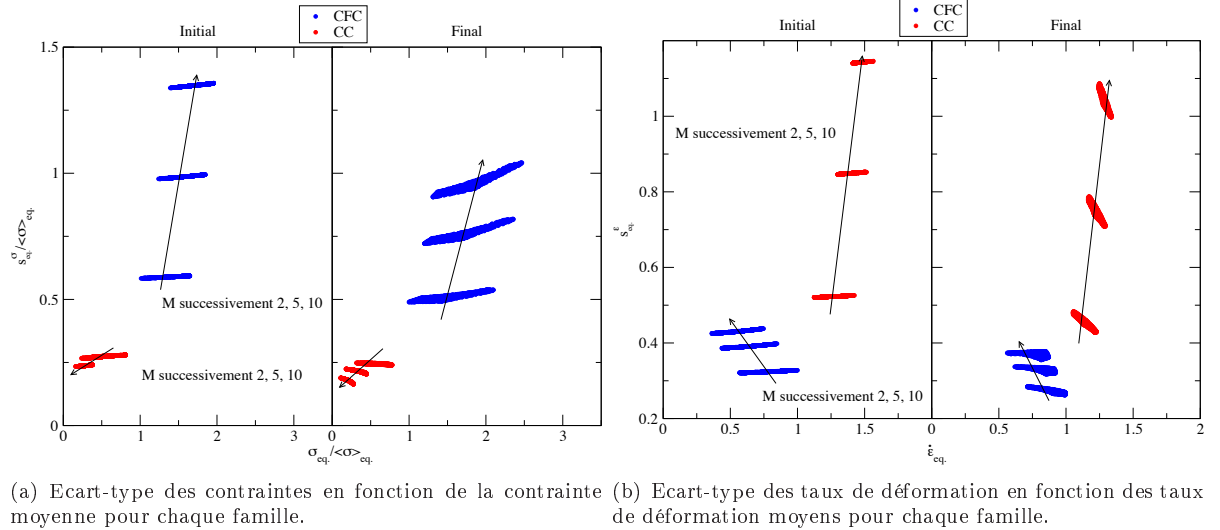


FIG. 4.7: Evolution des fluctuations des champs mécaniques au sein des familles d'orientations dans le cas biphasé linéaire avec contraste.

que les niveaux de fluctuation intra-orientation, qui peuvent être associés à l'ordonnée des nuages de points, sont très différents entre la phase dure et la phase molle. Enfin, de façon générale, l'évolution microstructurale conduit à une baisse du niveau de fluctuation intra-orientation.

Lorsque l'on s'intéresse plus particulièrement à la contrainte, figure 4.7(a), on note que le niveau de fluctuation au sein des orientations de la phase dure (CFC) augmente considérablement alors que les fluctuations dans les familles d'orientations de la phase molle (CC) sont peu sensibles à l'évolution du contraste. Avec l'évolution de la microstructure l'extension horizontale des nuages de points de la phase dure augmente, ce qui traduit une augmentation de l'hétérogénéité intraphase des moyennes, alors que, comme on l'a remarqué précédemment, l'hétérogénéité intra-orientation a tendance à décroître.

Pour ce qui est de la vitesse de déformation, figure 4.7(b), les fluctuations intra-orientation au sein des deux phases augmentent avec le contraste. Mais on note également que, dans la phase molle, l'extension horizontale du nuage de point décroît avec le contraste traduisant une baisse de l'hétérogénéité intraphase des moyennes. Lors de l'évolution, les nuages de points liés à la phase molle semblent "tourner", c'est-à-dire que leur hétérogénéité de fluctuation intra-orientation croît alors que l'hétérogénéité intraphase

des moyennes décroît. Ce comportement semble systématique et d'autant plus prononcé que le contraste augmente.

Remarque : Fluctuations et hétérogénéités

Nous utilisons dans les descriptions précédentes les fluctuations intra-orientation, ce type d'information pourrait également être obtenu à l'échelle des phases et du polycristal en considérant les identités suivantes qui seront formulées en termes de variance des tenseurs taux de déformation (une formulation équivalente s'en déduit pour les contraintes) :

$$V_\varphi(\underline{\dot{\epsilon}}) = \langle \underline{\dot{\epsilon}} \otimes \underline{\dot{\epsilon}} \rangle_\varphi - \langle \underline{\dot{\epsilon}} \rangle_\varphi \otimes \langle \underline{\dot{\epsilon}} \rangle_\varphi \quad (4.9a)$$

$$= \sum_r c_{|\varphi}^r \left[\langle \underline{\dot{\epsilon}} \otimes \underline{\dot{\epsilon}} \rangle_r - \langle \underline{\dot{\epsilon}} \rangle_r \otimes \langle \underline{\dot{\epsilon}} \rangle_r \right] - \sum_r c_{|\varphi}^r \left[\langle \underline{\dot{\epsilon}} \rangle_\varphi \otimes \langle \underline{\dot{\epsilon}} \rangle_\varphi - \langle \underline{\dot{\epsilon}} \rangle_r \otimes \langle \underline{\dot{\epsilon}} \rangle_r \right] \quad (4.9b)$$

$$= \sum_r c_{|\varphi}^r V_r(\underline{\dot{\epsilon}}) - \sum_r c_{|\varphi}^r \left[\langle \underline{\dot{\epsilon}} \rangle_\varphi \otimes \langle \underline{\dot{\epsilon}} \rangle_\varphi - \langle \underline{\dot{\epsilon}} \rangle_r \otimes \langle \underline{\dot{\epsilon}} \rangle_r \right] \quad (4.9c)$$

4.1.3 Comparaisons dans le cas monophasé non linéaire

Comme nous l'avons vu, VPSC utilise les modèles de linéarisation sécant et tangent pour simuler la réponse du matériau. Ces modèles, dans le cadre de cette implémentation, supposent l'égalité des exposants viscoplastiques entre les deux phases ce qui est une limitation par rapport à la formulation variationnelle de VARIPOLY et aux variantes plus récentes exactes au second ordre implémentées dans VPSC⁵. La figure 4.8 présente le comportement des phases pures pour des cisssions de référence unitaires. Sur ces figures, différents types de linéarisation sont considérés. Les résultats obtenus sont cohérents avec l'ordonnement habituellement observé entre les diverses formulations : le modèle sécant est le plus raide, le modèle variationnel a tendance à adoucir la réponse mais reste en général assez raide alors que le second ordre et le modèle tangent permettent de prévoir des réponses encore plus souples.

Afin de valider l'implémentation du modèle non linéaire nous allons comparer les résultats obtenus dans

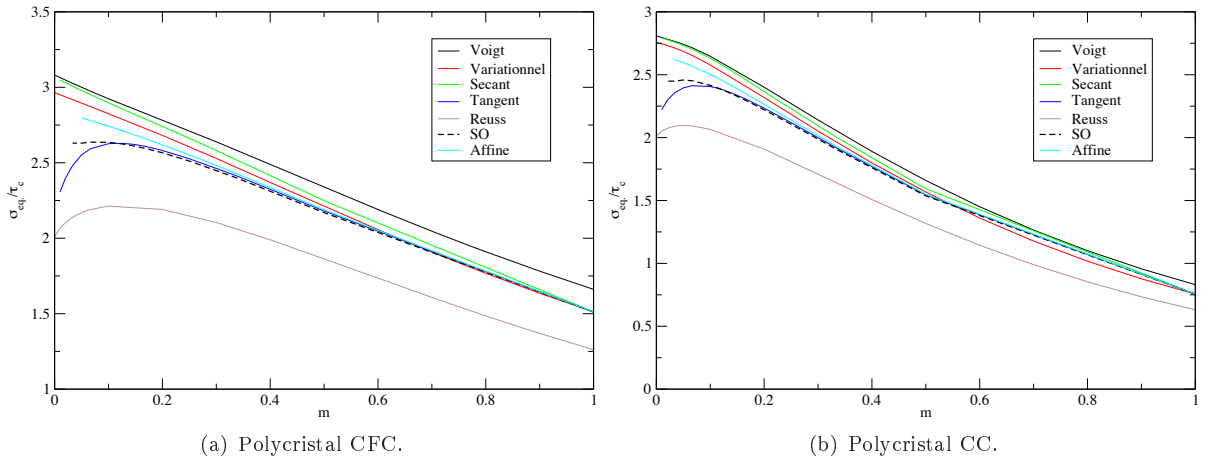


FIG. 4.8: Contrainte équivalente macroscopique obtenue pour les différents modèles sur des polycristaux monophasés non linéaires de texture isotrope sollicités en traction uniaxiale.

un cas monophasé avec des résultats issus de la littérature.

Les figures 4.8 sont obtenues pour des conditions de traction uniaxiale (4.10) en présence d'une texture isotrope.

$$\underline{\underline{L}} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & -\frac{1}{2} & 0 \\ 0 & 0 & -\frac{1}{2} \end{pmatrix} \quad (4.10)$$

La figure 4.8(a) décrit le comportement d'un polycristal CFC en fonction de son exposant viscoplastique, alors que 4.8(b) est son homologue dans le cas CC. Le point anguleux qui est observé pour certains

⁵L'implémentation actuelle de VPSC impose en outre aux exposants n d'être des entiers.

modèles dans le cas CC est lié à la nécessité de fournir au logiciel VPSC des exposants $n = 1/m$ entiers, il n'y a donc pas de valeurs intermédiaires calculées entre $m = 1$ et $m = 0.5$. Par ailleurs, on peut voir sur ces figures que les modèles tangent, affine et au second ordre posent des problèmes de convergence numérique pour les valeurs de n élevées. Néanmoins, on retrouve sur ces figures, pour $m = 1$, les valeurs prévues par les calculs analytiques dans le cas viscoplastique linéaire, le cas plastique parfait $m = 0$ donnant, dans le cas du modèle de Voigt, les valeurs classiques des “facteurs de Taylor”. Pour les points intermédiaires les valeurs obtenues présentent un très bon accord avec celles proposées par [136], [115] ou encore [24].

Dans le cas de la compression plane le troisième invariant des contraintes est différent, et on sait que ce paramètre a une influence dans le cas non linéaire [43]. On peut visualiser cette influence sur la figure 4.9, où l'on note que le chargement joue surtout pour les exposants n élevés (et il n'intervient pas dans le cas linéaire). Cette différence de comportement coïncide dans le cas plastique parfait avec celle prévue par [137].

Concernant les champs locaux dans ces polycristaux non linéaires monophasés, on peut se rapporter à la

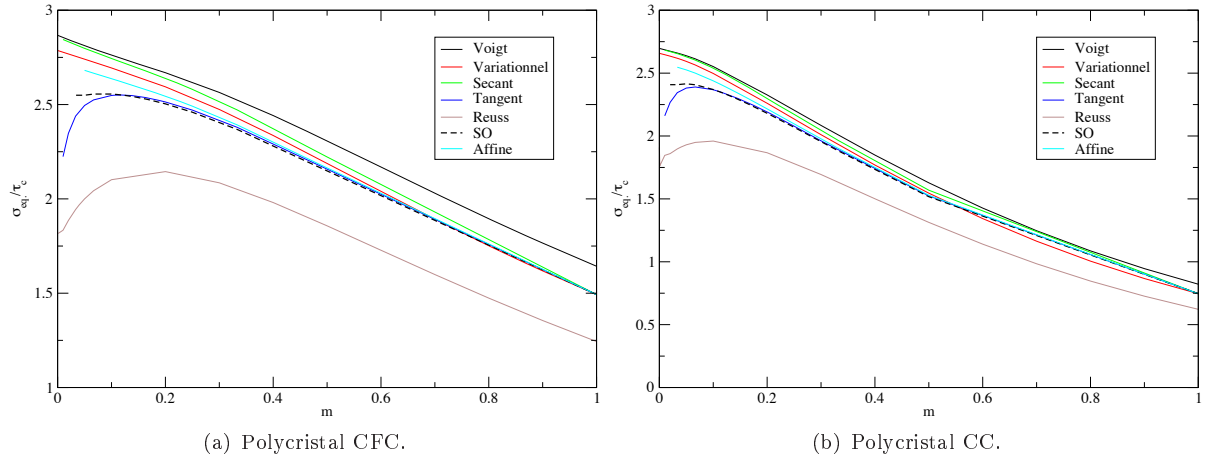


FIG. 4.9: Contrainte équivalente macroscopique obtenue pour les différents modèles sur des polycristaux monophasés non linéaires à texture isotrope sollicités en compression plane (4.1).

figure 4.10 qui prolonge les résultats de la figure 4.2 pour deux valeurs de l'exposant viscoplastique n . Les fluctuations intra-orientation et les hétérogénéités interphases des moyennes des contraintes dans le

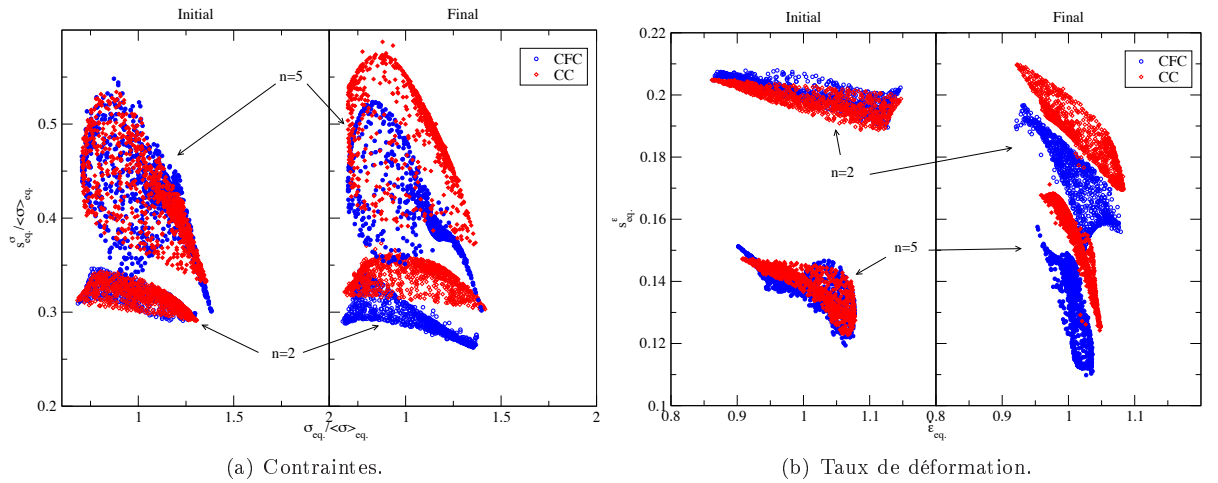


FIG. 4.10: Evolution des hétérogénéités au sein des familles d'orientations des polycristaux monophasés pour deux non linéarités différentes.

cas non linéaire semblent augmenter avec l'exposant n . Le phénomène inverse est observé concernant le taux de déformation. Cette observation va à l'encontre des résultats numériques et expérimentaux classiquement obtenus (voir par exemple [168, 161]) en effet, lorsque la non linéarité augmente il semble que ce soit l'hétérogénéité de taux de déformation qui prédomine habituellement sur l'hétérogénéité de contrainte. Ce défaut semble lié au choix du modèle de linéarisation utilisé, en effet Rekik [168] a montré, dans sa thèse, que ce phénomène était observé dans le cadre de la formulation variationnelle mais n'apparaissait pas pour d'autres linéarisations.

Nous noterons également à la figure 4.10(b), la présence d'un phénomène déjà rencontré dans le cas linéaire ; il s'agit de la rotation des nuages de points des taux de déformation intervenant au cours de la sollicitation.

Après ces validations et premiers résultats dans le cas monophasé, les polycristaux non linéaires biphasés sont envisagés afin de déterminer l'influence de la distribution des phases sur les réponses globales et sur les champs mécaniques.

4.2 Effets morphologiques dans les polycristaux biphasés non linéaires

Cette évaluation des effets de la répartition des phases va être menée dans un premier temps en considérant les réponses instantanées aux différentes échelles. Puis, nous nous intéresserons à l'évolution du matériau et à son influence sur la réponse mécanique.

4.2.1 Caractérisation instantanée

On peut tracer, à l'échelle macroscopique, les homologues des figures 4.9 dans le cas biphasé, en utilisant un modèle auto-cohérent pour décrire le MLC, pour des contrastes interphases de 1, 2 et 5 avec même fraction volumique des deux phases. Ces courbes (figure 4.11) présentent les caractéristiques précédentes des phases pures et sont d'autant plus distinctes que le contraste est important.

Mais les différents modèles envisagés ne caractérisent qu'un seul type de répartition des phases. Notre modèle à deux échelles a pour but de proposer une alternative au modèle auto-cohérent permettant de présenter différemment l'assemblage des phases. La figure 4.12 montre l'amplitude entre de tels modèles ayant fait le choix de la linéarisation variationnelle. Comme précédemment les résultats pour $m = 1$ ont été vérifiés analytiquement et la comparaison avec le calcul est présentée table A.2 de l'annexe A. Cette vérification permet de valider l'implémentation des modèles à deux transitions d'échelles dans le cadre linéaire.

On notera sur cette figure, qu'à faible contraste, ces modèles sont proches de l'auto-cohérent variationnel classique et ce d'autant plus que la non linéarité est importante. Pour un contraste important, par contre, les écarts liés aux différentes descriptions de la répartition des phases deviennent aussi importants que les écarts observés entre les diverses méthodes de linéarisation dans le cadre du modèle auto-cohérent, et ce, même pour un exposant n élevé. Cette observation justifie de s'intéresser à d'autres modèles de microstructures que le modèle auto-cohérent dans le cas biphasé contrasté. On notera que l'effet morphologique intervient également pour les faibles non linéarités, où il domine alors, naturellement, l'effet de la linéarisation.

Le matériau considéré étant un biphasé, nous pouvons considérer l'influence de la morphologie avec l'évolution de la fraction volumique en représentant les fuseaux de Hill macroscopiques associés aux différents modèles développés, pour des contrastes et des non linéarités variables. Pour des exposants n identiques, comme dans tous les cas traités jusqu'à maintenant, on obtient les graphes de la figure 4.13. L'ensemble de ces résultats peut nous permettre de caractériser l'effet du contraste, de la non linéarité et de la fraction volumique sur l'écart entre les modèles de Willis/Hashin-Shtrikman à l'échelle macroscopique. C'est en effet cet écart, séparant deux situations extrêmes, qui sera considéré représentatif de l'influence de la distribution de la microstructure biphasée du polycristal. On voit clairement à partir de la figure 4.12 que l'augmentation du contraste conduit à une augmentation de l'influence de la distribution des phases, alors que l'effet de la non linéarité dépend du contraste interphase. A fort contraste, l'augmentation de n fait croître l'influence de la distribution des phases alors qu'à faible contraste l'effet inverse est observé. En synthétisant les observations de la figure 4.13 au travers de la figure 4.14(a), on arrive aux mêmes conclusions et on remarque, en outre, que l'influence de la répartition des phases dépend assez peu de la fraction volumique. Cette figure est construite en introduisant une mesure pour quantifier l'influence

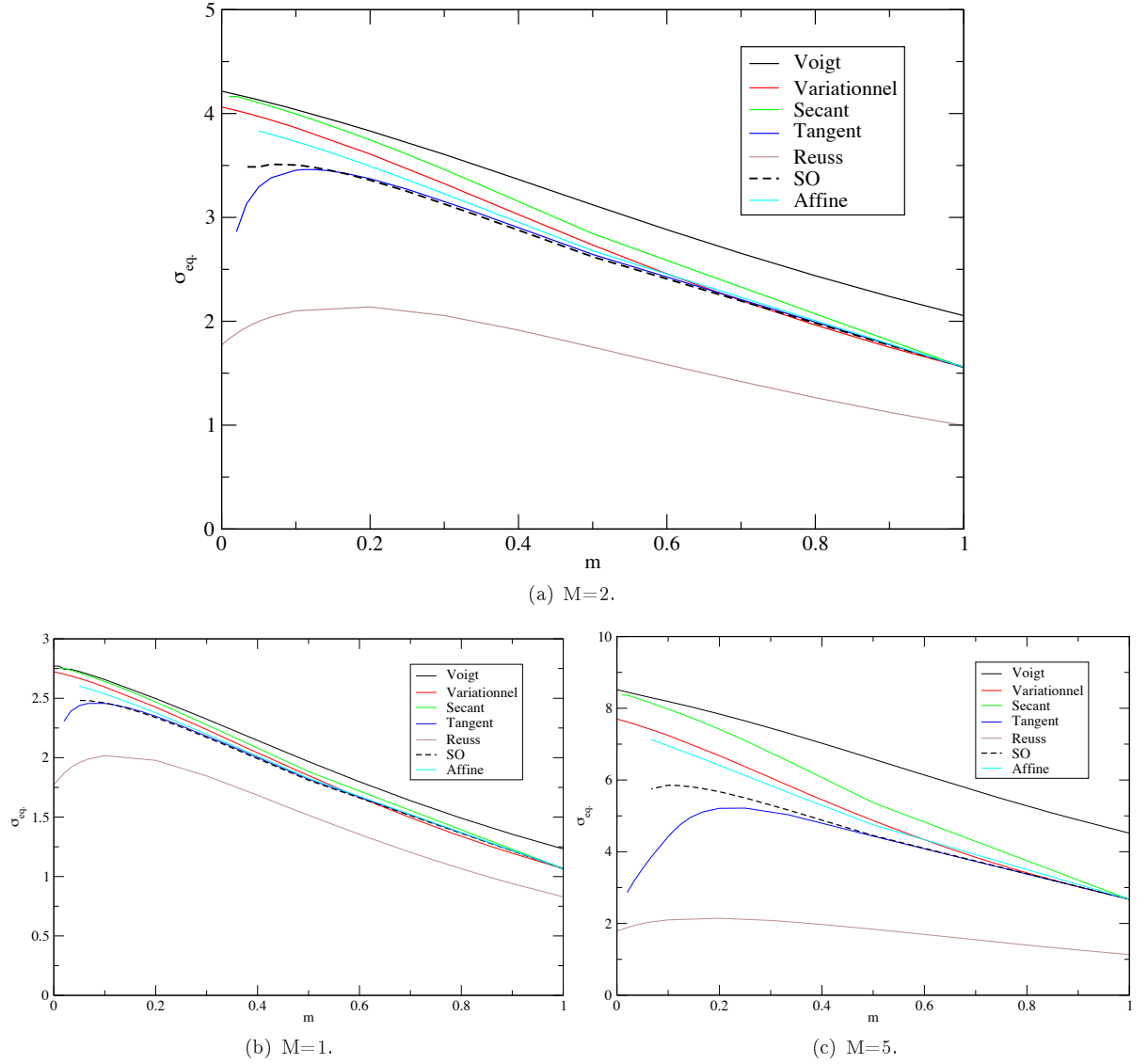


FIG. 4.11: Contraintes obtenues à l'aide des différents modèles pour des polycristaux biphasés non linéaires présentant un contraste interphase, une texture isotrope pour chaque phase et sollicités en compression plane.

de la morphologie des phases à l'échelle macroscopique. Celle-ci consiste à normaliser la différence des contraintes pour les modèles W/HS+ et W/HS- par la différence obtenue avec les modèles 2V et 2R. Ce rapport représente le rapport de réduction du fuseau de Hill lorsque l'on passe d'une situation où seule la fraction des phases est connue (2V, 2R), à une situation où l'on a une information sur la distribution des phases (W/HS±).

Dans la situation où il existe un contraste d'exposant viscoplastique $R = n_{\text{CFC}}/n_{\text{CC}}$, la figure 4.14(a) évolue et on obtient la figure 4.14(b). Cette évolution est complexe et semble affecter principalement les contrastes intermédiaires, les faibles et forts contrastes n'évoluant presque pas.

Ces simulations ont également montré que les modèles faisant apparaître de brusques variations du niveau de contrainte en fonction de la fraction volumique conduisaient à des problèmes de convergence⁶. C'est le cas, notamment, des modèles W/HS- et 2R pour les forts contrastes et exposants viscoplastiques lorsque le polycristal contient peu de phase molle.

⁶En effet, des fluctuations rapides du niveau de contrainte imposent à l'algorithme de minimisation des pas de recherche petits alors que des fluctuations trop faibles de la fonction à optimiser conduisent à une singularité lors du calcul du gradient. Afin d'éviter ce problème on peut imposer une fluctuation minimale pour la fonction (ici 10^{-8}).

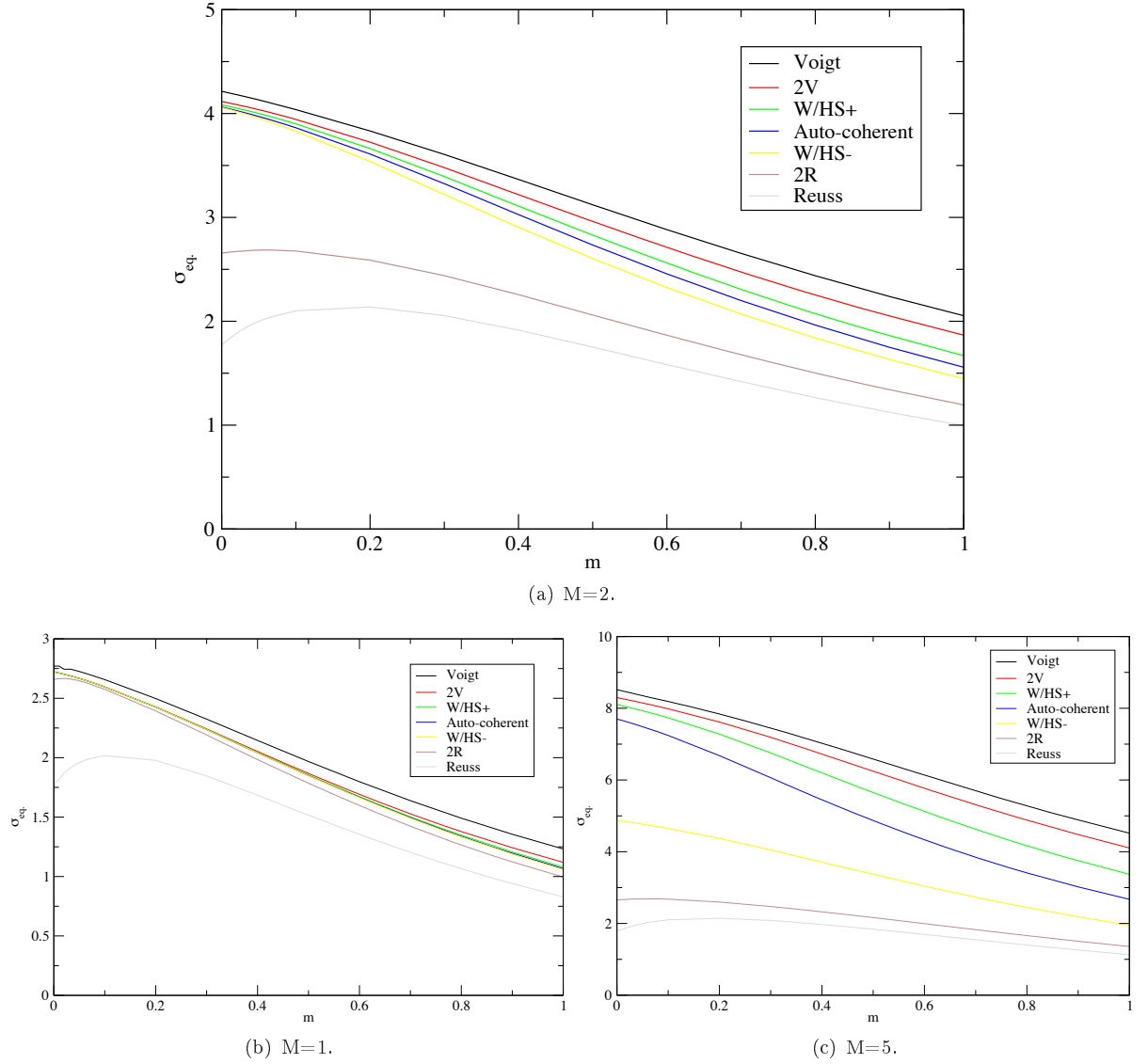


FIG. 4.12: Résultats obtenus pour les modèles à deux échelles dans la situation de la figure 4.11.

A l'échelle des phases, on peut représenter l'équivalent du taux de déformation moyen par phase et l'équivalent de la contrainte moyenne par phase, mais nous ne considérerons ici qu'un exemple de ce type de tracé (figure 4.15) et les mesures de l'influence de la distribution. Celles-ci sont définies, comme à l'échelle macroscopique, par le rapport des valeurs associées aux modèles $W/HS\pm$ et des valeurs associées à $2V$ et $2R$ mais, à ce niveau, ces valeurs peuvent être des contraintes ou des taux de déformation. Il est à noter que les courbes considérées ici (figure 4.16) ne concernent que la phase dure, phase pour laquelle l'écart entre les modèles est le plus important, afin d'avoir une mesure bien définie. Ces figures présentent une dépendance de l'influence de la distribution des phases en fonction du contraste et de la non linéarité similaire à celle observée à l'échelle macroscopique, cette influence augmente avec le contraste et varie avec la non linéarité de façon différente suivant que l'on est à fort ou à faible contraste. Néanmoins, il semble que le taux de déformation moyen par phase soit légèrement plus sensible à l'influence de la répartition que la contrainte moyenne par phase.

Un éclairage différent peut être apporté à la partition des taux de déformations moyens par phase en traçant (figure 4.17) cette quantité en fonction de l'exposant viscoplastique m . Une confrontation analytique des données linéaires de ces courbes est fournie en table A.3 de l'annexe A. Sur cette figure, il est manifeste que la partition du taux de déformation en fonction du modèle dépend fortement du contraste et de la non linéarité. En particulier, pour les forts exposants viscoplastiques, le modèle $W/HS-$ localise

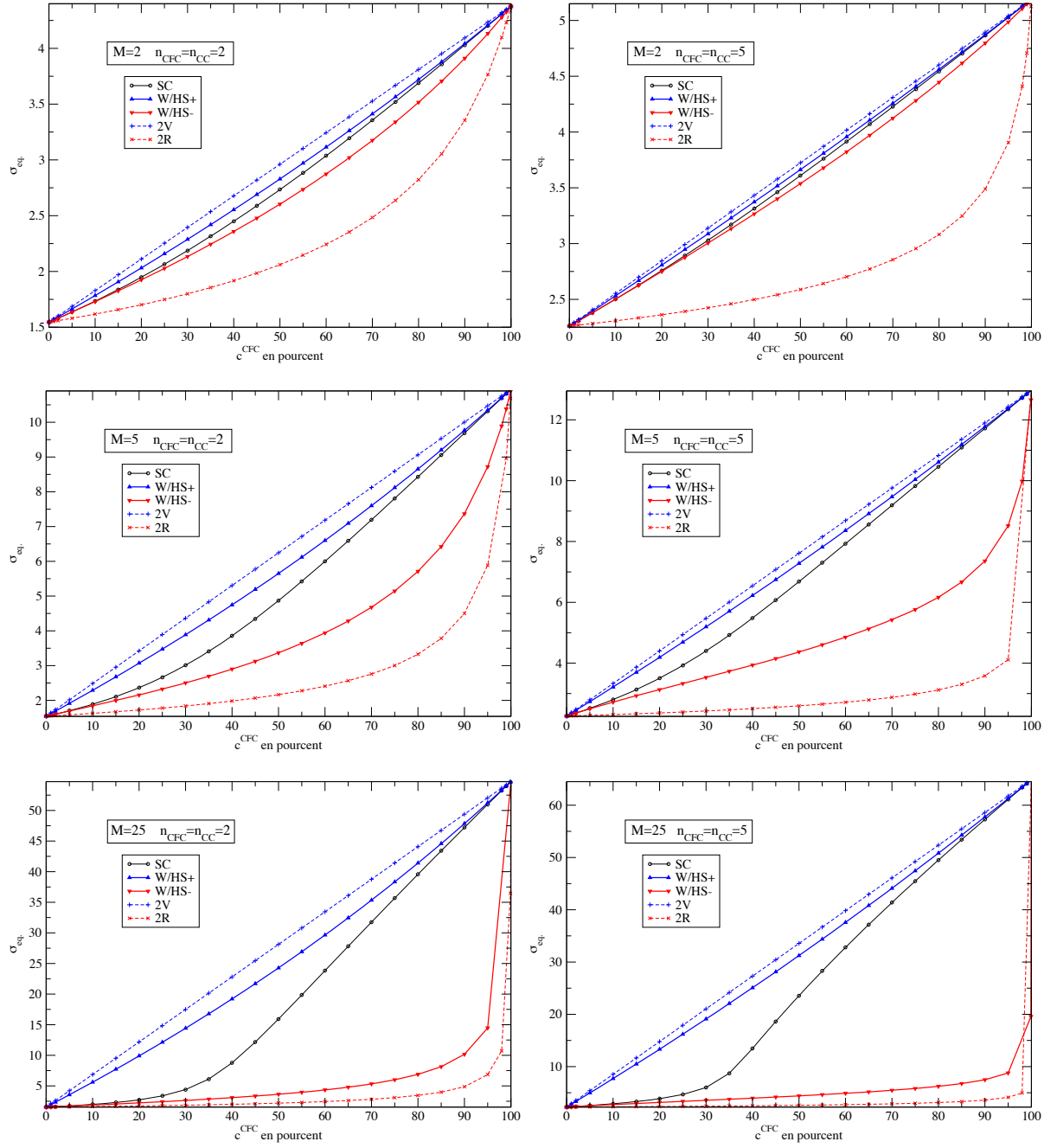


FIG. 4.13: Contrainte macroscopique obtenue suivant les différents modèles utilisés. De haut en bas le contraste vaut successivement 2, 5 et 25 et de gauche à droite la non linéarité des deux phases vaut 2 ou 5.

totallement le taux de déformation dans la phase molle pour un contraste de cinq alors que, pour un contraste de deux, il rejoint quasiment le modèle 2V décrivant des taux de déformation égaux entre les deux phases. Nous reviendrons sur cette propriété importante lorsque nous chercherons à modéliser un polycristal austéno-ferritique dans les chapitres suivants.

A l'échelle des familles d'orientations, on peut également s'interroger sur les différences d'hétérogénéité obtenues avec les différentes représentations de la microstructure. La figure 4.18 présente les fluctuations du taux de déformation pour chaque famille d'orientations en fonction de l'équivalent du taux de déformation moyen sur chaque orientation. Sur cette figure, les colonnes sont associées au modèle de

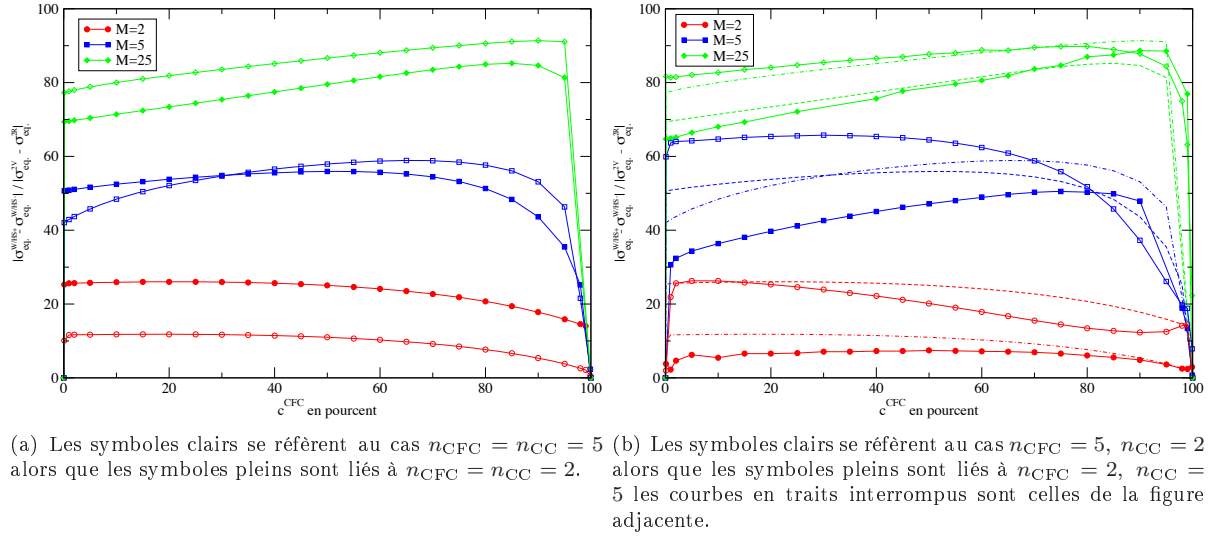


FIG. 4.14: Mesure de l'influence de la distribution des phases à l'échelle macroscopique exprimée en pourcents pour différents contrastes et non linéarités en présence ou non d'un contraste d'exposant viscoplastique.

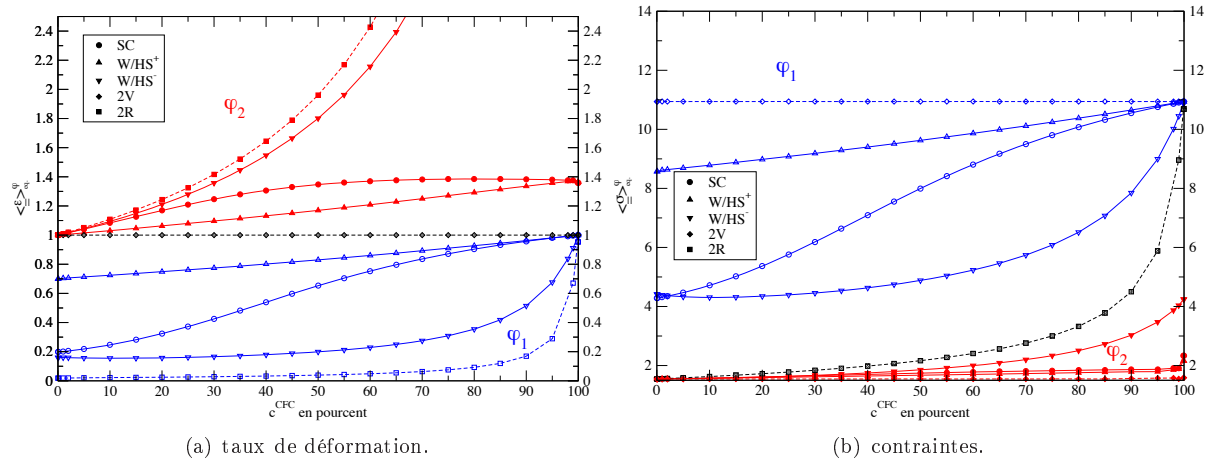


FIG. 4.15: Niveau de vitesse de déformation et de contrainte obtenus dans chaque phase du matériau biphasé en fonction du modèle considéré pour un contraste interphase de 5 et une non linéarité de 2 pour les deux phases (ϕ_1 désignant la phase dure et ϕ_2 la phase molle).

représentation du biphasé utilisé et les lignes désignent un contraste et une non linéarité spécifique.

Dans le cas des taux de déformation, on observe que le modèle W/HS+ impose des niveaux de fluctuation intra-orientation et des hétérogénéités intraphases des moyennes similaires pour les deux phases. Le passage au modèle auto-cohérent consiste essentiellement en une augmentation des fluctuations intra-orientations dans la phase molle et en une augmentation de l'hétérogénéité intraphase pour la phase dure. Pour le modèle W/HS-, on observe des hétérogénéités très importantes dans la phase molle alors que la vitesse de déformation est quasiment inhibée dans la phase dure, cette dernière peut même l'être totalement pour un contraste important et une forte non linéarité.

Concernant l'hétérogénéité locale des contraintes (figure 4.19), on observe un effet "dual", le modèle W/HS- conduit à des niveaux de fluctuation intra-orientation assez similaires pour les deux phases et un niveau d'hétérogénéité intraphase des moyennes plus important dans la phase dure. Le passage au modèle auto-cohérent puis à W/HS+ différencie fortement les hétérogénéités des champs dans les deux phases et ce d'autant plus que le contraste est marqué.

Nous voyons, à travers ces observations, l'importance que peut jouer la représentation microstructurale

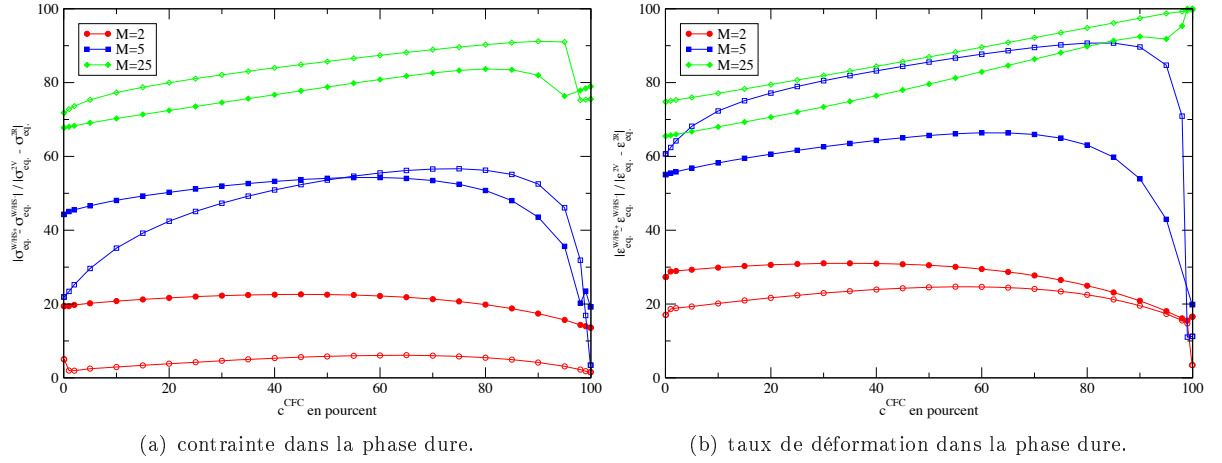


FIG. 4.16: Mesure en pourcents de l'influence de la répartition des phases basée sur l'état mécanique dans la phase dure. Les symboles clairs se réfèrent au cas $n_{CFC} = n_{CC} = 5$ alors que les symboles pleins sont liés à $n_{CFC} = n_{CC} = 2$.

sur les réponses globales et locales dans le matériau. Le contraste et la non linéarité peuvent amplifier ces différences suivant les configurations envisagées.

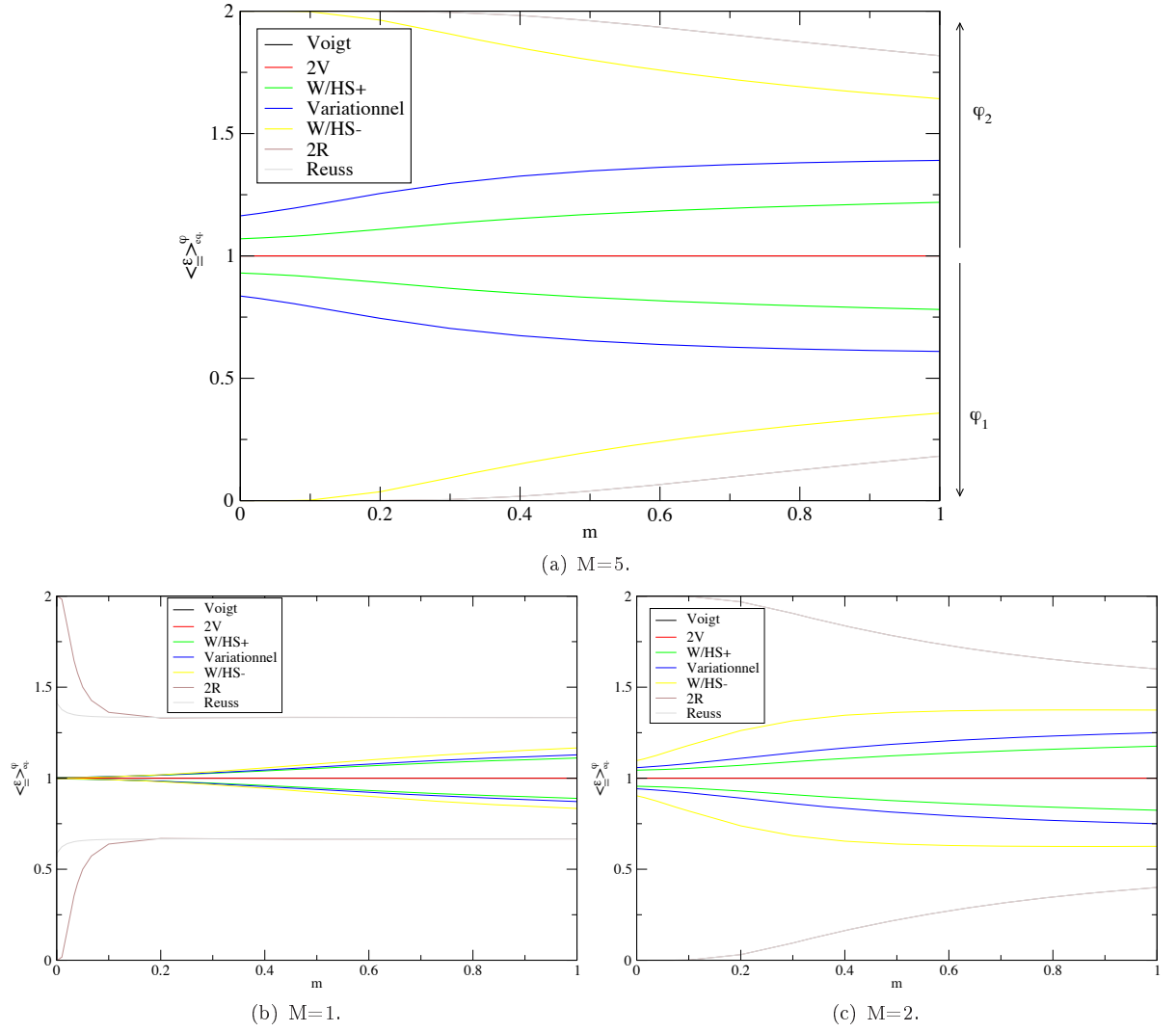


FIG. 4.17: Partition du taux de déformation en fonction de la non linéarité pour trois contrastes interphases et pour les différents modèles de polycristaux envisagés (φ_1 désigne la phase dure et φ_2 la phase molle).

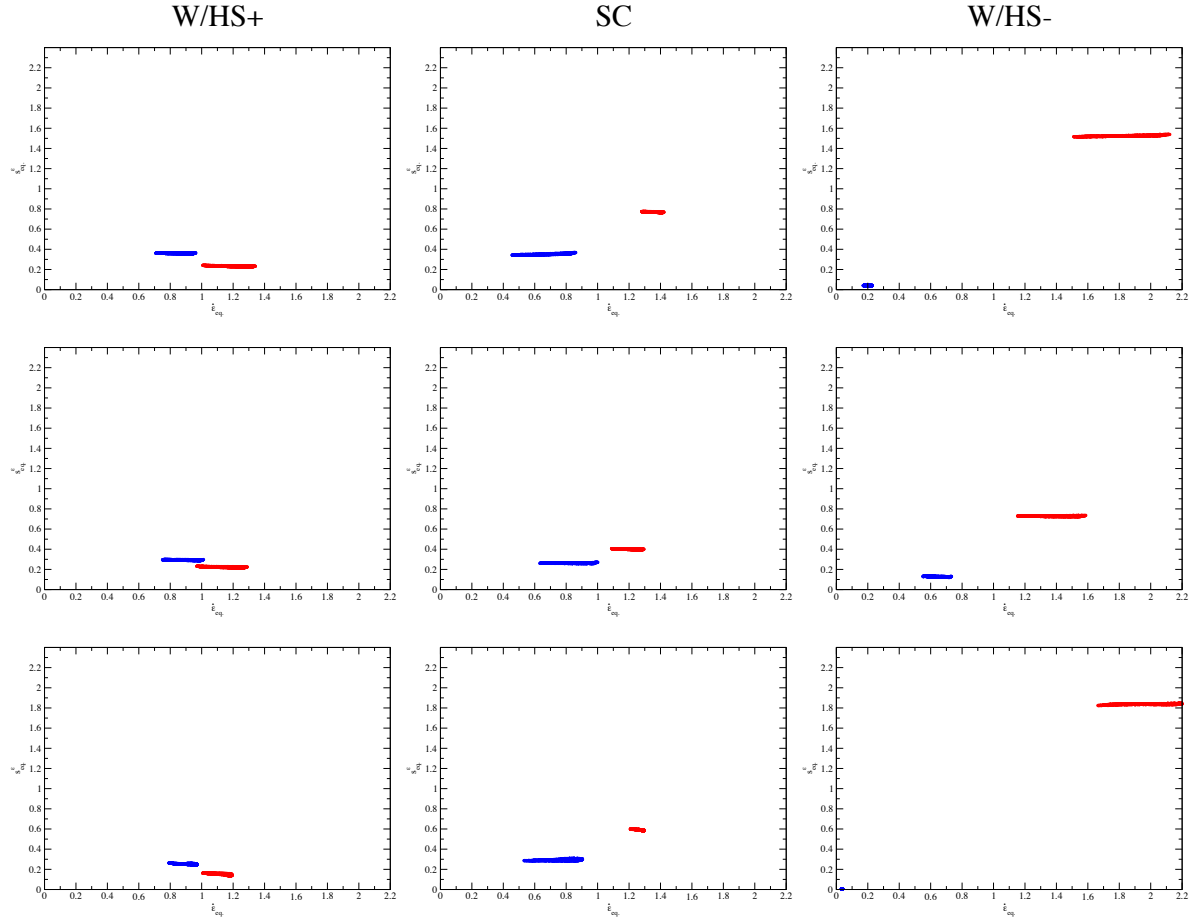


FIG. 4.18: Représentation des fluctuations locales du taux de déformation en fonction de l'équivalent de la moyenne des taux de déformation pour chaque famille d'orientations (en bleu dans la phase dure en rouge dans la phase molle). Les différentes lignes de cette figure se rapportent de haut en bas aux états suivants : $M = 5$ $n_{CFC} = n_{CC} = 2$, $M = 2$ $n_{CFC} = n_{CC} = 2$, $M = 5$ $n_{CFC} = n_{CC} = 5$.

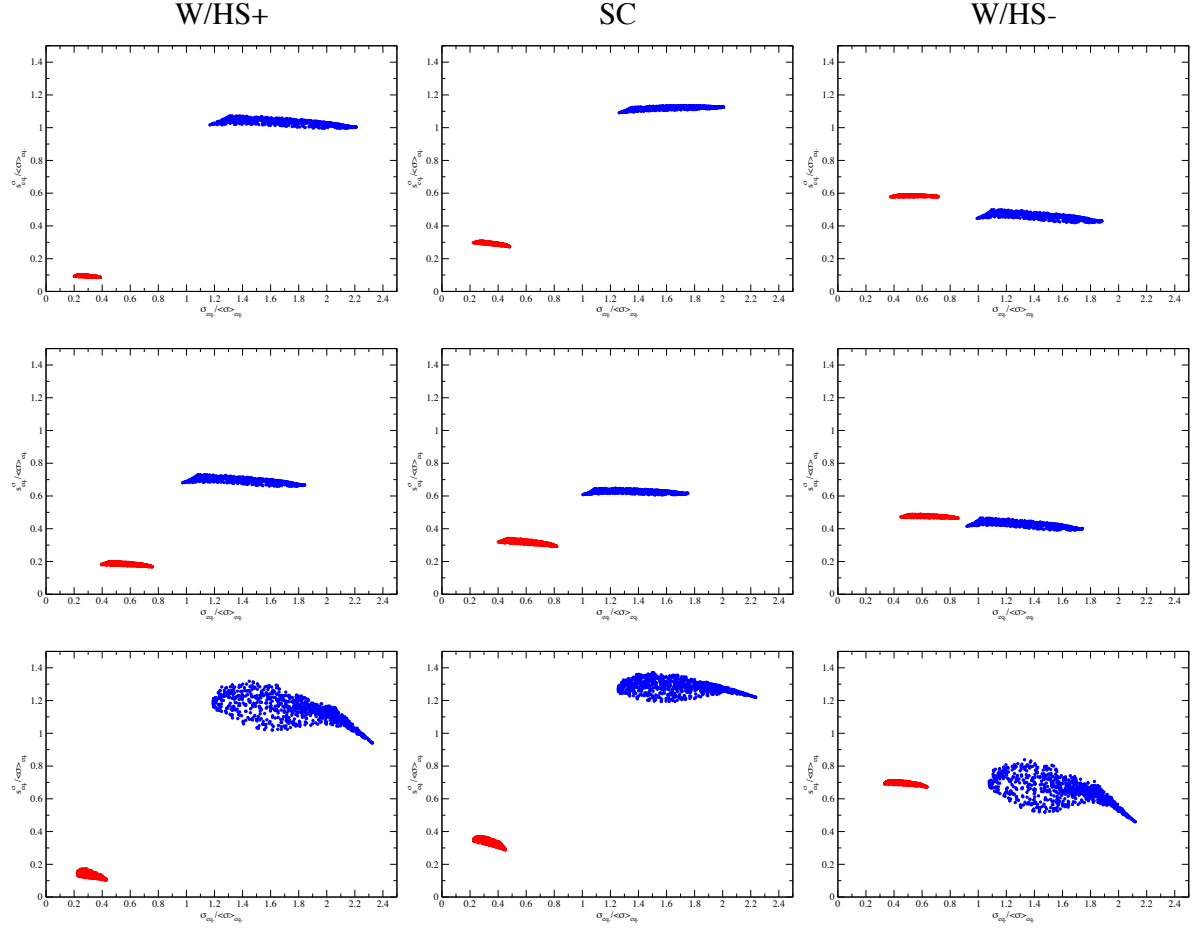


FIG. 4.19: Représentation des fluctuations locales de contrainte en fonction de l'équivalent de la moyenne des contraintes pour chaque famille d'orientations (en bleu dans la phase dure en rouge dans la phase molle). Les différentes lignes de cette figure se rapportent de haut en bas aux états suivants : $M = 5 \ n_{CFC} = n_{CC} = 2$, $M = 2 \ n_{CFC} = n_{CC} = 2$, $M = 5 \ n_{CFC} = n_{CC} = 5$.

4.2.2 Evolution du matériau

Nous ne considérerons dans cette partie que les évolutions liées à la morphologie en laissant de côté les questions liées à l'écroissage intracristallin non utilisé ici. La figure 4.20 présente l'évolution de l'écoulement de polycristaux biphasés composés de 50% de phase CFC et de 50% de phase CC, au cours de la sollicitation, pour différents contrastes et non linéarités. Ces évolutions font intervenir à

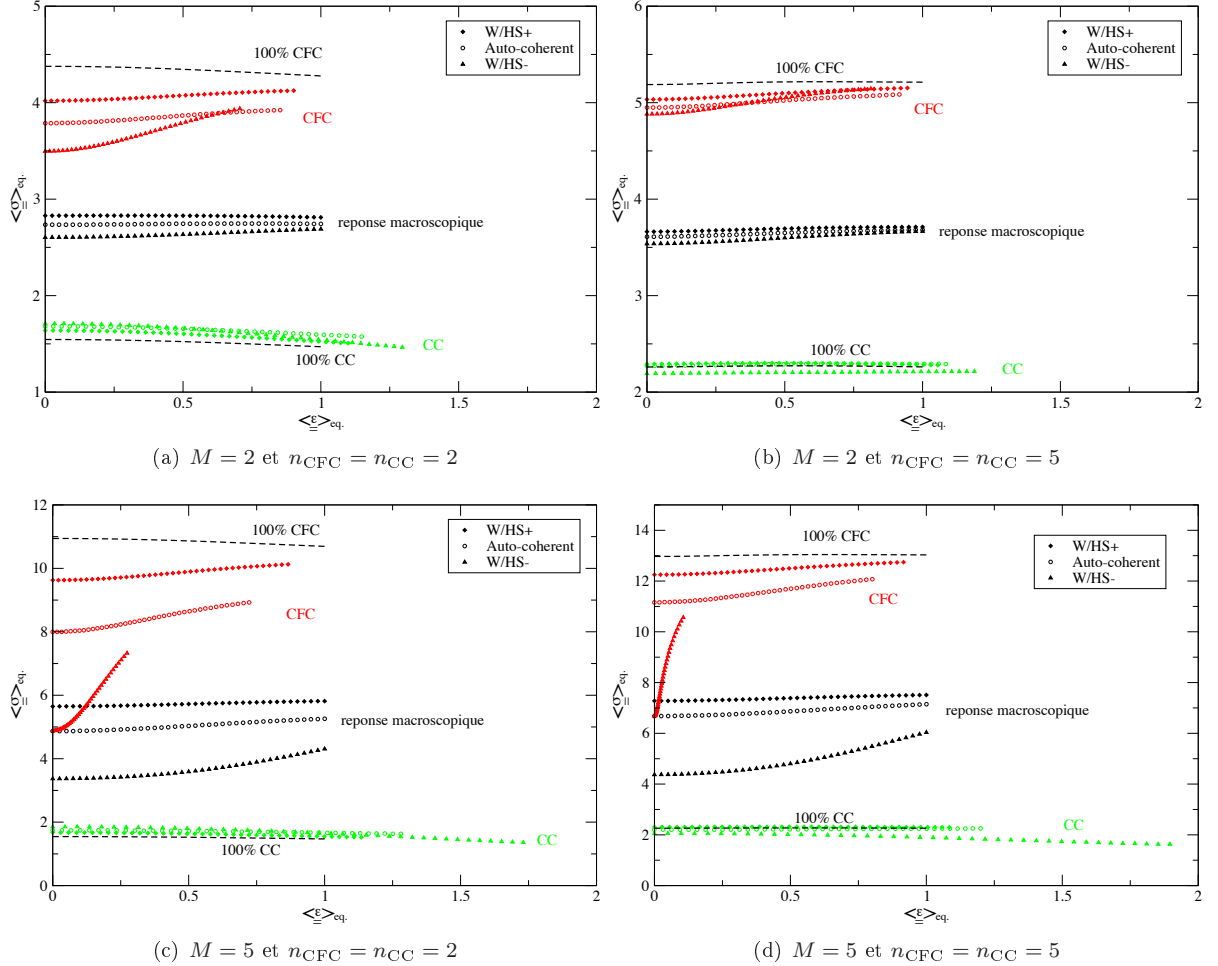


FIG. 4.20: Evolution des comportements macroscopiques (noir) et par phases (couleur) pour des polycristaux biphasés (50/50) non linéaires contrastés. L'écoulement des phases pures est représenté en traits interrompus.

la fois les modifications morphologiques et la réorientation des grains. Pour un contraste important ($M = 5$) les évolutions prévues par ces différents modèles sont très différentes montrant, une fois encore, l'importance d'une bonne représentation de la microstructure biphasée. On notera en particulier les écarts marqués entre les réponses par phase (figure 4.20) dans le cas W/HS-. Ces écarts sont liés à l'évolution microstructurale qui va influencer sur la partition des taux de déformation entre les deux phases comme en atteste l'évolution de l'espacement horizontal des points des courbes d'écoulement de la phase dure. Cette augmentation de vitesse conduit à une contrainte d'écoulement plus élevée qui traduit l'écroissage géométrique du matériau.

Le raisonnement précédent appliqué à la comparaison des écoulements moyens pour la phase CC et pour le polycristal monophasé CC semble conduire à des résultats paradoxaux. On observe une vitesse moyenne pour la phase plus élevée dans le cas biphasé et pourtant cette fraction du matériau présente une contrainte d'écoulement plus faible (dans le cas du modèle W/HS-) que celle du polycristal monophasé. Ce phénomène peut s'expliquer par le caractère non linéaire des comportements. En effet, comme nous l'avons rappelé au chapitre 2 et comme on le voit à la figure 4.21, la contrainte d'écoulement est fortement liée à la fluctuation des taux de déformation, or comme nous pouvons le vérifier en comparant les figures

4.10(b) et 4.18, l'hétérogénéité de taux de déformation dans la phase molle est bien plus importante dans le cas biphasé (W/HS-) que dans le cas du polycristal monophasé.

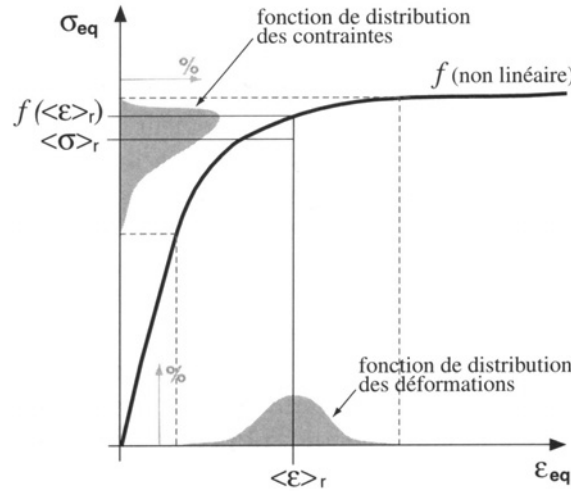


FIG. 4.21: Schéma présentant l'importance de la prise en compte des fluctuations de déformation (ou de taux de déformation) pour la prévision de la contrainte moyenne par phase. On s'aperçoit ici, qualitativement, que l'augmentation des fluctuations de déformation ou de la "non linéarité" du comportement provoquera un adoucissement d'autant plus marqué. (d'après [23])

Remarque : Croisements des courbes d'écoulement macroscopiques

Des simulations pour différentes fractions volumiques montrent que suivant l'importance du contraste et de la non linéarité des croisements peuvent être observés (figure 4.22) pour les biphasés composés de différentes fractions de phase. C'est-à-dire par exemple que pour un contraste $M = 5$ et des exposants de 5 un polycristal biphasé composé de 70% de phase dure mais présentant un arrangement proche de W/HS- sera plus mou qu'un biphasé présentant 50% de phase dure répartie suivant un modèle auto-cohérent. On remarque, en outre, comme précédemment que des évolutions importantes de l'écoulement peuvent apparaître dans le cas du modèle W/HS- pour ces niveaux de contrastes et de non linéarité.

L'évolution de la microstructure est donc distincte dans les différentes approches. La figure 4.23 montre les textures finales obtenues dans chaque phase avec ces différentes modélisations dans le cas d'un contraste de cinq et d'un exposant non linéaire de deux pour un polycristal présentant même fraction volumique de chaque phase. On reconnaît bien ici des textures caractéristiques du laminage de structures cristallographiques CFC et CC comme on peut en voir, par exemple, dans [37, 112, 97]. L'évolution de la texture par phase est plus ou moins marquée suivant la répartition des phases dans le matériau, W/HS- favorisant la réorientation dans la phase CC alors que W/HS+ favorise la phase CFC. Il est assez surprenant de noter que pour la phase CC la texture prévue dans le cas du modèle SC semble moins développée que celle obtenue à l'aide du modèle W/HS+.

En ce qui concerne l'évolution de la morphologie des grains, on peut tracer le rapport de forme des ellipsoïdes introduits dans le cadre des différents modèles en fonction de la déformation macroscopique du polycristal. Dans le cas auto-cohérent classique, il n'existe qu'un seul ellipsoïde alors que dans les modélisations à deux échelles, l'hypothèse de séparation d'échelles a permis d'introduire un tenseur microstructural par phase et un tenseur microstructural à l'échelle du polycristal (§3.1). Le rapport de forme considéré ici est Z_{22}/Z_{33} dans les axes de sollicitation. En toute rigueur, ce rapport de forme devrait être calculé dans le repère principal de l'ellipsoïde et être complété d'un second ratio (par exemple Z_{11}/Z_{22}) pour caractériser entièrement la symétrie de répartition. Mais, partant d'une texture initiale isotrope et sollicitant le matériau en déformation plane, les rotations de l'ellipsoïde modélisant la distribution des phases sont négligeables et Z_{11} reste sensiblement égal à l'unité. On peut donc mener les calculs dans le repère de départ et ne conserver qu'un seul rapport de forme. Le même rapport sera considéré pour les

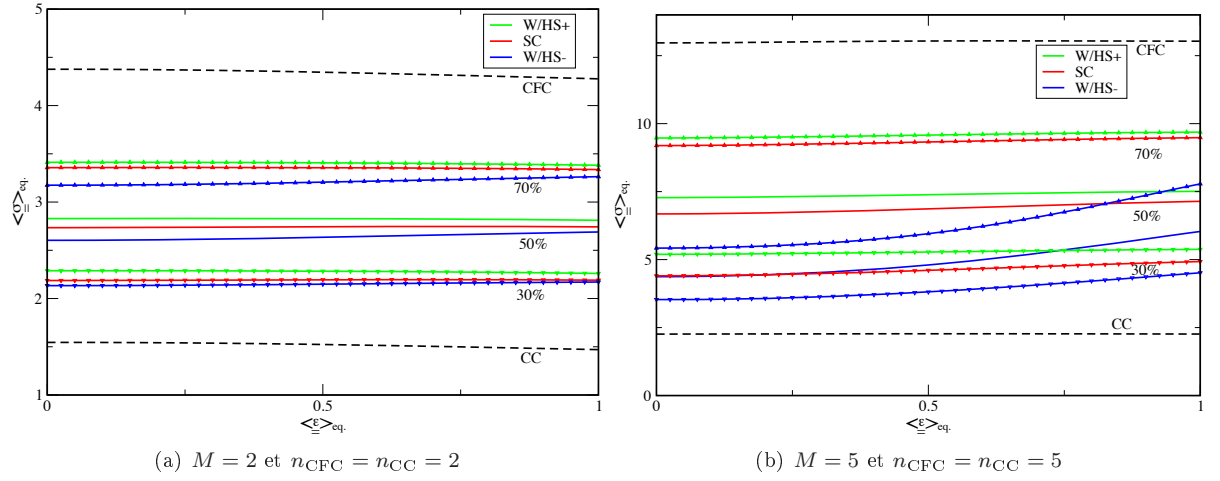


FIG. 4.22: Evolution des écoulements macroscopiques et mise en évidence de croisements (les symboles sur les courbes se rapportent à une composition donnée).

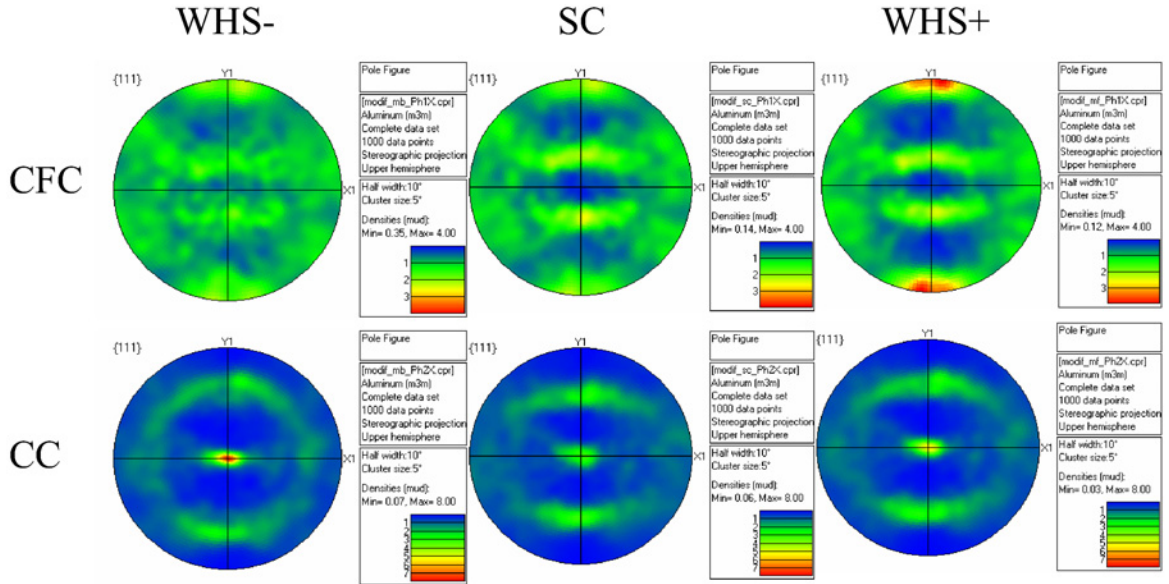


FIG. 4.23: Textures finales obtenues à l'aide des différents modèles (SC désigne le modèle auto-cohérent) la texture initiale étant isotrope pour chacune des phases. La direction Y1 est la direction de laminage alors que X1 est la direction transverse 5.18

ellipsoïdes définis à l'échelle des phases afin de comparer ces ratios. Comme pour la texture, le modèle W/HS- a tendance à accélérer l'évolution morphologique au sein de la phase CC mais limite celle des grains de la phase CFC.

Enfin l'évolution du matériau nous permet de compléter les graphiques des figures 4.18 et 4.19 en ajoutant, sur les figures 4.25 et 4.26, les dispersions des champs mécaniques après évolution. Les contraintes dans les familles d'orientations évoluent assez peu dans la phase dure, mis à part dans le cas du modèle W/HS-. Les fluctuations ont tendance, quant à elles, à décroître avec l'évolution du matériau sauf à nouveau dans le cas de la phase dure associée à un assemblage W/HS-. Nous voyons donc que la répartition microstructurale du matériau peut jouer fortement sur l'évolution des contraintes dans la phase dure, ce qui est cohérent avec les observations de la figure 4.20 concernant la réponse globale. Dans le cas du taux

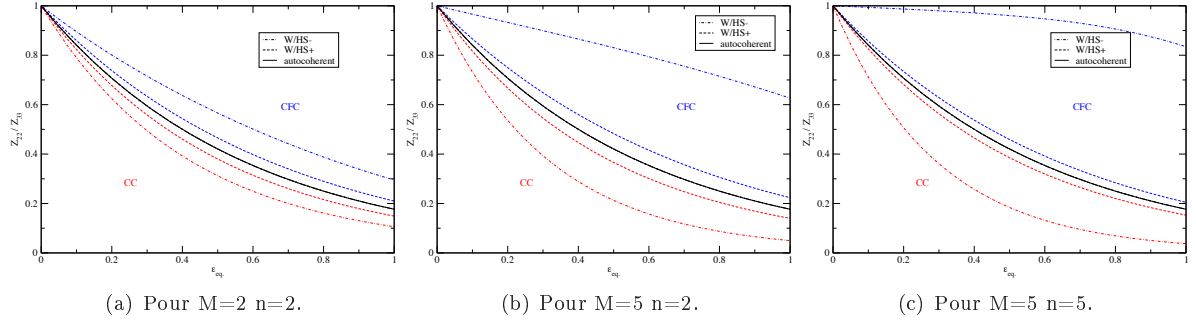


FIG. 4.24: Evolution de la forme des ellipsoïdes au cours de la déformation.

de déformation, il est remarquable de voir qu'après avoir accommodé une grande part de la déformation, la vitesse de déformation dans les grains de la phase molle décroît, alors que la phase dure se déforme de plus en plus en moyenne.

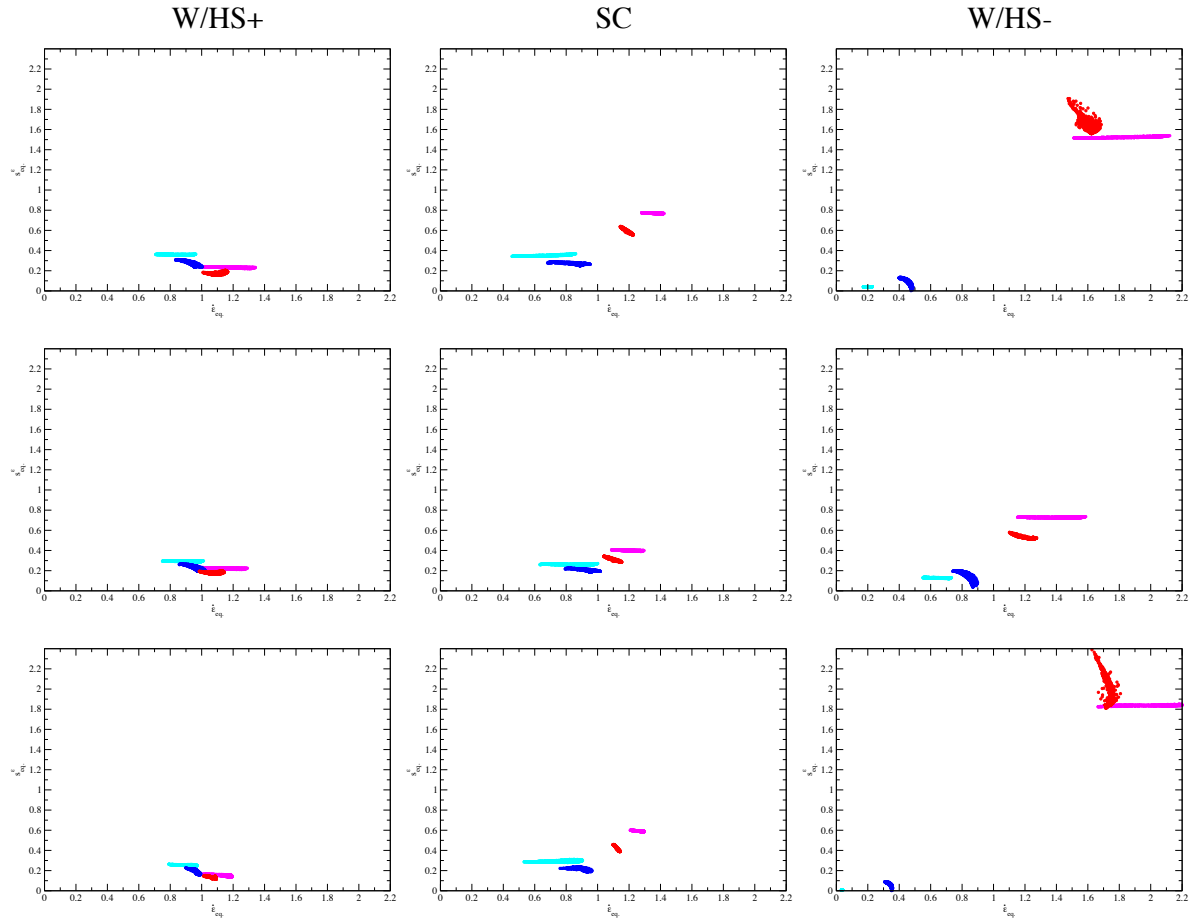


FIG. 4.25: Evolution des moyennes et des fluctuations des taux de déformation dans la phase dure (initial en bleu clair, final en bleu) et dans la phase molle (initial en rose, final en rouge). Première ligne $M = 5$ $n_{CFC} = n_{CC} = 2$, deuxième ligne $M = 2$ $n_{CFC} = n_{CC} = 2$, troisième ligne $M = 5$ $n_{CFC} = n_{CC} = 5$.

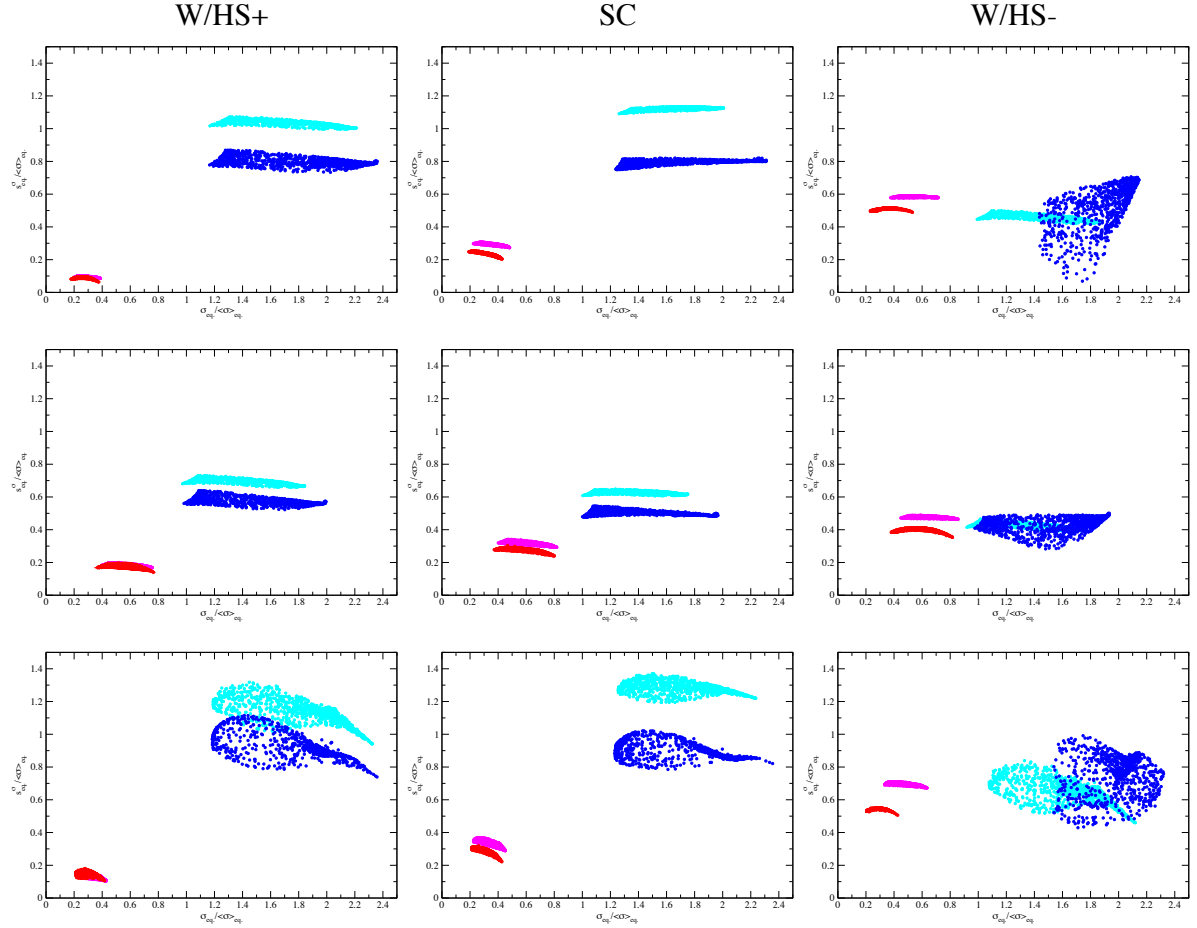


FIG. 4.26: Evolution des moyennes et des fluctuations des contraintes dans la phase dure (initial en bleu clair, final en bleu) et dans la phase molle (initial en rose, final en rouge). Première ligne $M = 5$ $n_{CFC} = n_{CC} = 2$, deuxième ligne $M = 2$ $n_{CFC} = n_{CC} = 2$, troisième ligne $M = 5$ $n_{CFC} = n_{CC} = 5$.

4.2.3 Influence de la morphologie sur l'évolution mécanique du matériau

L'évolution de l'écoulement viscoplastique du matériau fait intervenir à la fois la réorientation des familles de grains et l'évolution des fonctions de corrélation au travers des tenseurs microstructuraux. Il serait intéressant de comprendre le rôle relatif de ces mises à jour sur l'écoulement effectif du matériau. On pourrait, par la même occasion, savoir si les degrés de liberté ajoutés sur la description microstructurale du matériau dans le cas à deux échelles (trois tenseurs microstructuraux au lieu d'un seul) apportent une modification notable aux différentes échelles. Afin d'atteindre cet objectif, nous allons réaliser une simulation semblable à celle conduisant aux résultats de la figure 4.20(c) en bloquant l'évolution morphologique, c'est-à-dire que toutes les fonctions de corrélation présenteront la même symétrie du début à la fin et ce quel que soit le modèle. Nous commençons par envisager une forme sphérique puis nous utiliserons un tenseur microstructural de rapport $Z_{22}/Z_{33} = 0.5/1.5$. La figure 4.27 montre que dans le cas sphérique aucune évolution du comportement n'a lieu, alors que pour la même simulation partant d'un ellipsoïde allongé dans la direction de laminage⁷, il y a une évolution durant toute la sollicitation. Cette évolution conduit au durcissement des écoulements prévus par le modèle auto-cohérent et à un adoucissement pour les deux modèles à deux échelles. La comparaison des niveaux de contraintes initiaux sur les graphes de la figure 4.27 représente l'influence de la symétrie des fonctions de corrélation à texture donnée (les valeurs principales de $\underline{\underline{Z}}$ choisies ici sont comparables à celles apparaissant au cours d'une des simulations précédente : voir figure 4.24), alors que l'évolution des écoulements de la figure 4.27(b) avec la déformation est liée au développement de la texture au cours de la sollicitation (à tenseur microstructural

⁷On rappelle que les composantes principales de $\underline{\underline{Z}}$ sont les inverses des demi-axes de l'ellipsoïde (§3.5.2).

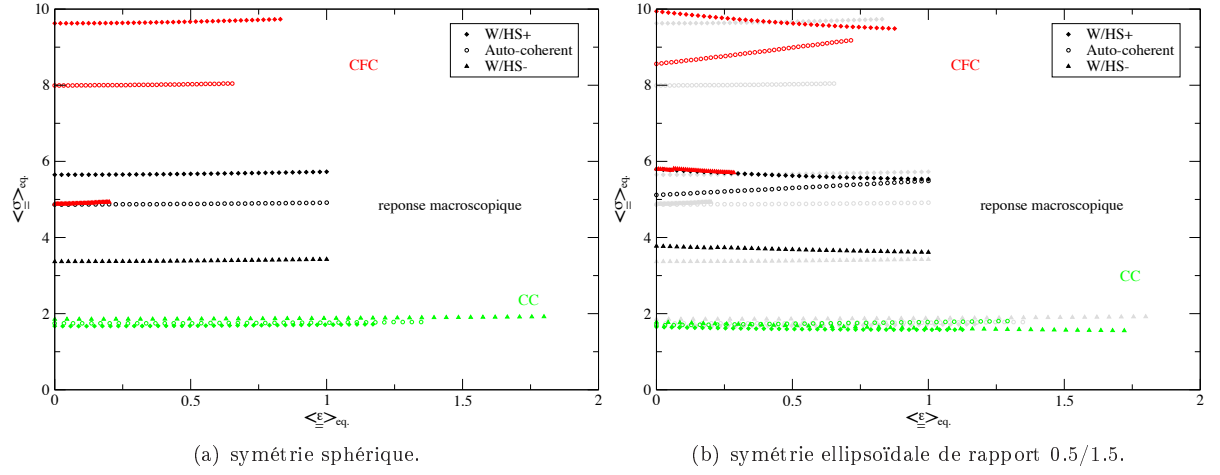


FIG. 4.27: Evolution de l'écoulement ($M = 5$ $n_{CFC} = n_{CC} = 2$) dans le cas d'une morphologie fixe de forme donnée.

donné). Ces deux effets semblent donc importants au vu de la figure 4.27(b) et couplés⁸ d'après le graphe 4.27(a).

On envisage maintenant de laisser la morphologie évoluer mais en forçant tous les tenseurs microstructuraux à évoluer de la même façon dans les modèles à deux échelles ; ce test nous permet de voir l'influence des degrés de liberté supplémentaires dans le cadre de l'hypothèse de la double séparation d'échelle. On

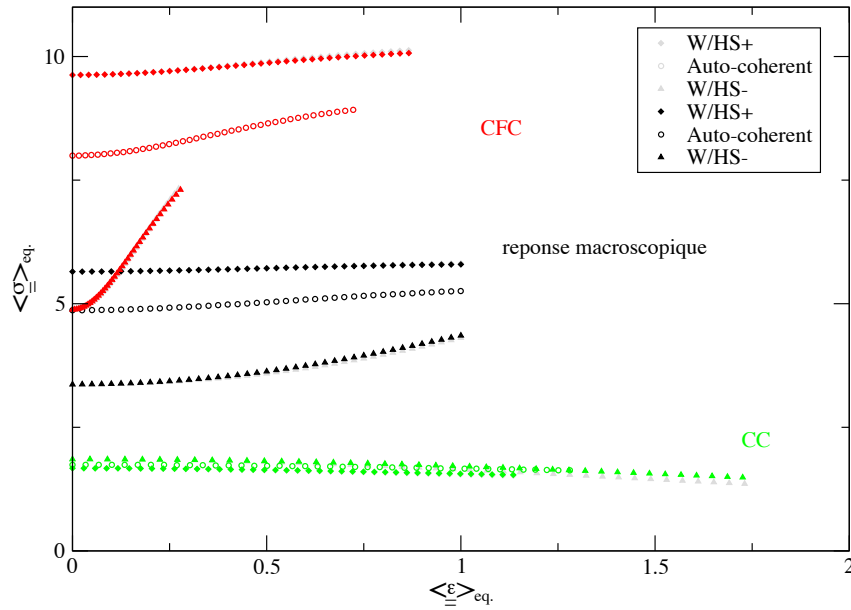


FIG. 4.28: Comparaison des écoulements prévus dans le cas du modèle à deux échelles tel qu'il a été défini au chapitre précédent (gris), avec ceux obtenus lorsque les tenseurs microstructuraux intraphase sont assujettis à évoluer comme le tenseur microstructural modélisant la répartition des phases (couleur).

s'aperçoit sur la figure 4.28 que cet effet est très faible du point de vue de la réponse mécanique. L'effet le plus important, bien qu'encore marginal, est observé pour le modèle W/HS- qui est bien celui pour lequel l'écart entre les trois ellipsoïdes est le plus important. On peut donc conclure que l'évolution de l'écoulement est fortement dépendante de l'évolution morphologique à l'échelle des phases. Par contre, l'ajout de degrés de liberté supplémentaires joue très peu sur l'écoulement macroscopique et sur les moyennes

⁸Ce couplage apparaît à travers la définition de $\hat{\omega}$.

par phase. L'écoulement mécanique dépend donc essentiellement du modèle d'homogénéisation et de la fonction de corrélation liée aux phases lorsqu'initialement tous les tenseurs microstructuraux sont pris identiques.

Conclusions

Ce chapitre a permis de valider l'implémentation du modèle variationnel biphasé dans le cadre du code VARIPOLY. Cette validation a mis à profit différents résultats de la littérature ainsi que des calculs analytiques pour des situations simples.

A l'aide de ces cas test, il a été possible de caractériser l'influence de la répartition des phases sur le comportement instantané d'un polycristal biphasé. A l'échelle macroscopique cet effet s'est révélé comparable à celui de la technique de linéarisation dès une valeur de contraste $M = 2$ et pour un exposant viscoplastique $n_{\text{CFC}} = n_{\text{CC}} \leq 2$. Cet effet s'intensifie lorsque M augmente et l'effet de la non linéarité amplifie le phénomène pour des contrastes élevés alors qu'elle l'inhibe pour des contrastes plus faibles. La même observation peut être faite à l'échelle des phases bien que cet effet soit plus marqué sur la vitesse de déformation que sur la contrainte. Enfin les hétérogénéités inter et intra-orientation sont également fortement influencées par la répartition des phases.

L'évolution du comportement diffère également en fonction du modèle d'assemblage choisi. Néanmoins nous avons vu que les degrés de liberté supplémentaires autorisés par l'hypothèse de séparation d'échelle ne semblaient pas avoir un rôle prédominant dans cette évolution du comportement. Cette étude du modèle à deux échelles semble encourageante pour la prévision des comportements observés lors de l'étude bibliographique du chapitre 1 car différents effets sont bel et bien attendus en fonction de la distribution des phases.

Chapitre 5

Quelques caractérisations expérimentales des matériaux étudiés

Sommaire

5.0	Cadre du travail	122
5.1	Elaboration et exemples de caractérisations microstructurales	123
5.1.1	Elaboration des matériaux	124
5.1.2	Exemple de caractérisation chimique et microstructurale	125
5.1.2.a	Préparation du matériau	125
5.1.2.b	Analyse morphologique et cristallographique	127
5.1.2.c	Composition chimique des phases	135
5.1.3	Bilan	135
5.2	Comportement macroscopique et évolution microstructurale	137
5.2.1	Essai de bipoinçonnement	137
5.2.2	Corrections appliquées	138
5.2.3	Résultats pour les phases pures	139
5.2.3.a	Identification des exposants viscoplastiques	140
5.2.4	Résultats dans le cas biphasé	141
5.2.4.a	Comportement macroscopique	141
5.2.4.b	Evolution de la microstructure	143
5.3	Estimation des champs de déformation locaux	146
5.3.1	Principe de la micro-extensométrie	146
5.3.2	Méthode expérimentale	151
5.3.2.a	Montage	151
5.3.2.b	Préparation de surface	152
5.3.3	Mesures pour deux microstructures	155
5.3.4	Bilan	162

Introduction

Le chapitre 1 nous a familiarisés avec les aciers inoxydables austéno-ferritiques et avec quelques résultats issus de la bibliographie sur ce thème. Cette partie a, quant à elle, un double objectif : définir un ensemble de procédures expérimentales permettant le dialogue modèles/expériences et mettre en place ces caractérisations dans le cadre de matériaux austéno-ferritiques élaborés à l'université de Sheffield.

Le cadre dans lequel a été réalisé ce travail est tout d'abord introduit dans une section préliminaire. Nous expliciterons ensuite le choix des nuances considérées avant de présenter la méthode d'élaboration des matériaux. Une analyse permettant l'obtention de caractéristiques microstructurales utiles, dans le cadre de nos modélisations, sera également proposée sur une nuance particulière.

La section 5.2 sera dédiée à l'essai choisi pour solliciter les matériaux à haute température et les résultats macroscopiques obtenus pour les phases pures et pour certains biphasés. Nous présenterons également, à ce niveau, l'évolution de la microstructure au cours de la sollicitation.

La suite de ce chapitre s'intéressera à une méthode expérimentale permettant d'obtenir une information mécanique plus locale et dépouillera les champs de déformation associés à deux microstructures différentes. Enfin, ce chapitre sera clôturé en résumant les aspects remarquables qui auront été signalés au cours de cette étude expérimentale et que nous chercherons à reproduire à l'aide de nos modèles, dans les parties suivantes de ce mémoire.

5.0 Cadre du travail

Cette partie expérimentale devait initialement proposer des caractérisations multi-échelles complètes sur plusieurs nuances biphasées, ce qui devait nous donner les moyens de conclure quant à l'existence d'un effet de la répartition des phases dans le matériau. En effet, en considérant des matériaux présentant des fractions de phases différentes, nous pouvions espérer rencontrer des situations où l'une des phases serait plutôt en matrice et d'autres où aucune phase ne jouerait de rôle particulier. De plus, la caractérisation des phénomènes locaux intervenant dans les matériaux devait permettre d'inspirer des modifications et des améliorations à apporter aux modèles, afin de nous rapprocher des configurations expérimentales.

La quasi-totalité des développements expérimentaux devaient être menés à l'université de Sheffield dans le cadre d'un échange de quelques mois (environ un mois par an). Cette collaboration devait nous permettre de bénéficier des moyens de caractérisation et d'élaboration très développés existant sur place, ainsi que de la grande culture développée sur ce type de matériau du fait des partenariats nombreux avec des industriels britanniques s'intéressant à ces nuances biphasées.

Mais cet objectif initial s'est vite révélé trop ambitieux dans le cadre d'un échange d'une durée aussi courte. En effet, nous n'avions pas réellement mesuré, par exemple, que l'obtention de champ de déformation à l'échelle locale, sur un matériau biphasé sollicité à haute température, nécessitait une préparation longue et complexe, qu'il fallait souvent répéter un grand nombre de fois pour atteindre un résultat satisfaisant vis-à-vis des méthodes d'analyses que nous souhaitions mettre en œuvre. Il aura ainsi fallu à Hernandez Castillo [73] et à Boldetti [18] utiliser toute leur opiniâtreté pour pouvoir, au cours de leur thèse, réaliser quelques mesures de déformation locales sur un acier austéno-ferritique. Egaler cette performance en quelques mois semblait difficile, alors il était utopique de penser pouvoir réaliser une série d'essais sur des matériaux différents. Nous avons donc dû nous résoudre à limiter nos ambitions et avons pris le parti d'utiliser les données fournies par différents auteurs ayant caractérisé une "classe" de matériaux biphasés élaborés à l'université de Sheffield¹.

L'étude de microstructure a été réalisée au Laboratoire de Mécanique des Solides, à partir des nuances fournies par Boldetti [18] et menée avec le concours de Chakroun [31] dans le cadre de son stage d'option. Les caractérisations à l'échelle macroscopique se basent sur les résultats de Brown [27] et les grilles permettant la mise en place des mesures locales sont celles de Hernandez Castillo [73] et de Pinna [149], la faisabilité de cette dernière procédure ayant préalablement fait l'objet des stages de Patiño [145] et de Arnoux [7].

Malheureusement, ces auteurs intéressés par des aspects différents du comportement des matériaux, n'ont pas toujours relevé des informations qui nous seraient pourtant très utiles dans notre étude, ainsi par exemple : Hernandez Castillo n'a jamais reporté les écoulements macroscopiques se rapportant à ses mesures locales et Brown a très peu caractérisé les microstructures associées aux matériaux sur les-

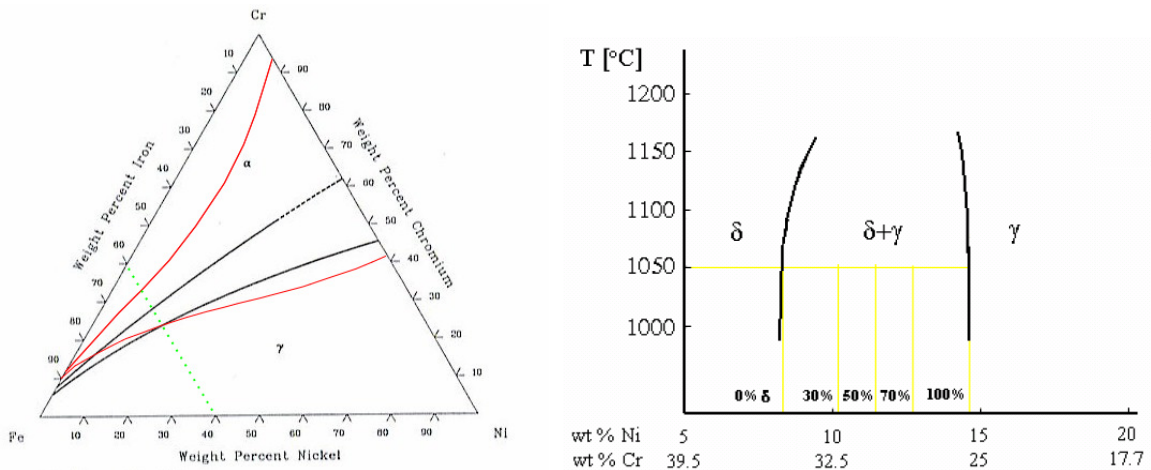
¹Nous avons néanmoins pu participer, dans le cadre de ce travail, à la réalisation de plusieurs micro-grilles (utilisées pour les mesures de déformations locales). Les essais sur ces grilles, obtenus avec l'aide de Boldetti, se sont cependant révélées moins exploitables que celles de Hernandez Castillo.

quels il a réalisé ses essais macroscopiques. Nous ne disposons donc que d'informations partielles sur ces matériaux. Ayant conscience de cette limitation, nous en tiendrons compte dans nos comparaisons modèles/expériences qui seront certainement plus difficiles à mettre en place et à interpréter du fait de cette source d'incertitudes.

L'objectif du présent chapitre est donc principalement de proposer un ensemble de caractérisations susceptibles d'être mises en œuvre sur les matériaux afin de nous fournir les données nécessaires à l'utilisation de nos modèles d'homogénéisation et, de façon plus générale, de nous donner des informations sur les phénomènes apparaissant lors de la sollicitation à haute température de tels matériaux.

5.1 Elaboration et exemples de caractérisations microstructurales

Notre travail a pour objectif la compréhension et la quantification des interactions entre ferrite et austénite au sein d'un acier duplex austéno-ferritique. Il serait donc idéal de pouvoir disposer d'une famille de nuances permettant d'obtenir des aciers biphasés contenant des fractions d'austénite et de ferrite variables et des configurations microstructurales différentes, mais pour laquelle la composition de ces constituants serait identique. Cette idée n'est pas nouvelle et une procédure permettant l'obtention d'une telle classe de matériaux a été développée à l'université de Sheffield au travers des travaux de nombreux métallurgistes [134, 4, 148, 58, 27, 18]. La définition de ces alliages repose sur une propriété du diagramme ternaire représenté figure 5.1(a). Nous pouvons noter, en effet, que les frontières entre les domaines austénitiques et ferritiques décrites dans la littérature évoluent peu, pour une fraction de fer de l'ordre de 60%, dans un domaine de température allant de 1300°C à 900°C. Le protocole imaginé



(a) Diagramme ternaire Fe-Cr-Ni [1] pour deux températures (b) Vue en coupe du diagramme ternaire obtenue à partir de en noir $T=1300^{\circ}\text{C}$, en rouge $T=1000^{\circ}\text{C}$, les pointillés verts résultats expérimentaux [4]. décrivent la section qui nous intéresse plus particulièrement.

FIG. 5.1: Frontières entre les domaines de phases sur le diagramme ternaire Fe-Cr-Ni et sur une section de celui-ci.

par Al-Jouni et amélioré ensuite par Izquierdo, Pinna et Boldetti conduit même à des différences encore inférieures (figure 5.1(b)) ; ce qui est mis sur le compte d'un recuit suffisant pour atteindre réellement l'équilibre. Ainsi, en faisant évoluer le rapport chrome/nickel, on peut obtenir la famille de biphasés recherchée.

Dans cette étude, toutes les nuances présentées à la table 5.1 seront considérées, leur fraction d'austénite en fonction de leur ratio Ni/Cr est présenté figure 5.2. Cependant, comme nous l'avons précisé à la section 5.0, bien qu'un large éventail de propriétés soit disponible globalement pour cette classe de matériaux, aucune nuance n'a été caractérisée totalement vis-à-vis de l'ensemble de ces procédures. A ces matériaux "modèles", au sens où ils présentent une microstructure et une composition plus simples que les matériaux commerciaux, élaborés à l'université de Sheffield ; il faudra également ajouter l'alliage I désignant une nuance industrielle, fournie par Avesta Sheffield ayant fait l'objet d'études préliminaires [7, 149], de

Auteur	Désignation	fraction d'austénite (%)	Ni (wt %)	Cr (wt %)	Fe (wt %)
[27]	A	1.5	7.5	33.5	59
[27]	B	1.5	8.3	33.2	58.5
[27]	C	22	9.6	30.4	60
[58], [73]	D	47	11.6	29.6	58.8
[27]	E	48	10.8	27	62.2
[27]	F	60	11.8	25.4	62.8
[18]	G	53	11.9	30.7	57.4
[27]	H	95	13.6	25.1	61.3

TAB. 5.1: Nuances austéno-ferritiques élaborées à l'université de Sheffield et considérées durant cette étude.

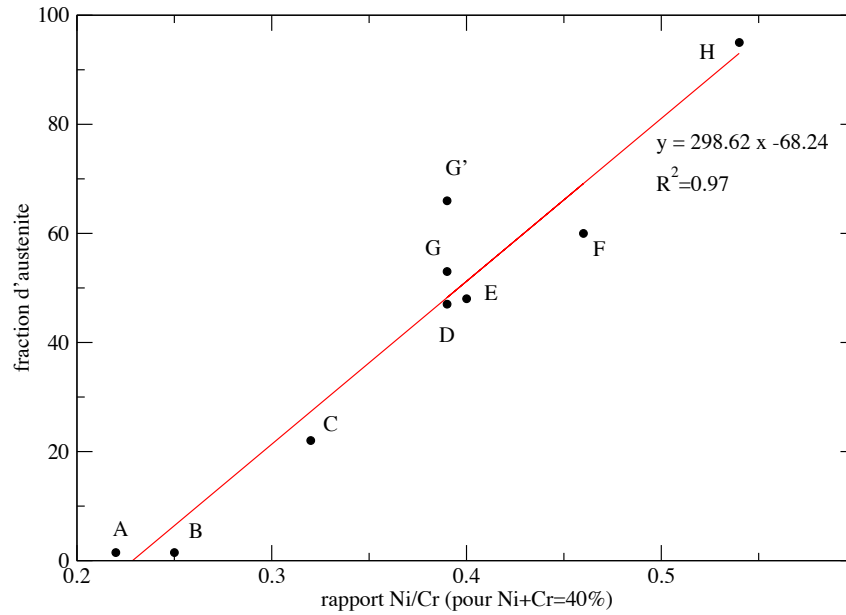


FIG. 5.2: Evolution de la fraction d'austénite mesurée en fonction de la composition du matériau.

composition en pourcentage massique d'éléments d'alliage 21.6Cr-5.7Ni-3.2Mo. Ce dernier matériau est composé de près de 50% de chaque phase.

5.1.1 Elaboration des matériaux

Les matériaux modèles sont obtenus par fonderie à partir des trois éléments constitutifs. Cette étape est réalisée habituellement sous vide afin d'éviter l'oxydation du chrome et son "envol". Mais dans l'ensemble de ces études les coulées ont dû être réalisées sous atmosphère naturelle, ce qui a nécessité une adjonction² de chrome afin de compenser les pertes.

Après la coulée, le matériau va ensuite subir une forte déformation afin d'initier des germes de recristallisation au sein de la microstructure de fonderie grossière. Un recuit, réalisé sous atmosphère inerte afin de limiter l'oxydation, va être utilisé pour permettre la recristallisation et obtenir la fraction d'austénite recherchée. Le matériau sera ensuite trempé à l'eau afin de figer sa microstructure.

Dans le cas de Brown [27], la déformation est obtenue par laminage à haute température ($\approx 1260^\circ\text{C}$) pour limiter la formation des défauts évoqués en 1.1.2. La procédure utilisée qui consiste à passer d'une épaisseur de 40mm à une épaisseur de 15mm est effectuée en plusieurs passes, ce qui nécessite de remettre

²Un ajout de 3% semble permettre une telle compensation pour la méthode d'élaboration considérée d'après les mesures de Brown [27, 18].

le matériau au four durant les périodes interphase. Les échantillons sont ensuite recuits à 1150°C durant deux cents heures pour les matériaux biphasés et seulement une heure pour les phases pratiquement pures. Ces traitements permettent l'obtention de microstructures équiaxes (suivant une section orthogonale à la direction de laminage). Dans le cas biphasé, la taille de grain est limitée durant le long recuit par la présence de deux phases, ce qui n'est pas le cas des matériaux monophasés pour lesquels un traitement plus court est donc utilisé.

Dans le cas de Izquierdo [58] et de Hernandez Castillo [74], la déformation est obtenue par extrusion à l'aide du protocole de Al-Jouni [4]. On passe d'une section circulaire de diamètre 120mm à une section rectangulaire de 30×15mm² ; cette transformation se fait à 1050°C à l'aide d'une presse de 1000 tonnes. Le traitement thermique est ensuite réalisé à 1100°C pendant quatre-vingt seize heures. La déformation par extrusion est plus propice à l'apparition de fissures et de défauts décrits à la figure 1.3(b). Ce mode de déformation principalement utilisé à l'origine pour briser la microstructure de coulée est aujourd'hui remplacé par un laminage, procédé faisant apparaître moins de défauts et permettant ainsi de réaliser des éprouvettes saines de plus grandes dimensions.

Le cas qui va être développé dans ce chapitre, et qui se veut un cas modèle pour cette famille de matériaux, est la nuance G élaborée par Boldetti. Ce matériau est obtenu par laminage à 1100°C. Durant cette étape on passe d'un parallélépipède de 35×35×70mm³ à un volume dont les dimensions avoisinent 20×40×110mm³. Le recuit est réalisé à 1050°C durant cent vingt heures.

Quelques caractérisations chimiques et microstructurales de l'alliage G vont maintenant être présentées. Elles ont pour but d'illustrer les microstructures typiquement rencontrées pour cette "classe" de matériaux et d'introduire des méthodes de mesure pertinentes en vue d'un dialogue modèle/expérience. Bien que la microstructure du matériau G présente un aspect caractéristique des matériaux "modèles", il est à noter que certaines nuances, utilisées dans notre étude, semblent s'en écarter sensiblement comme le suggèrent les micrographies optiques des matériaux E et C élaborés par Brown. Celles-ci sont présentées à la figure 5.3.

5.1.2 Exemple de caractérisation chimique et microstructurale

Caractériser l'agencement microstructural du matériau polycristallin consiste à décrire la distribution de ses phases et de ses orientations cristallographiques. Il faut donc, pour cela, disposer de méthodes d'observations permettant de distinguer ces hétérogénéités. Nous allons proposer ici des mesures susceptibles de nous fournir des informations utilisables dans le cadre de nos modélisations. A titre d'illustration la caractérisation d'un échantillon de matériau G sera réalisée.

Il est de plus nécessaire de s'assurer de la conformité des compositions obtenues dans le cas présent vis-à-vis des figures 5.1(b) en analysant, à l'aide d'une technique adéquate, la composition de chaque phase. On peut vérifier par la même occasion l'homogénéité de composition pour différents points de la surface étudiée. L'analyse sera conduite sur une zone d'extension maximale afin d'obtenir des données statistiquement représentatives du matériau.

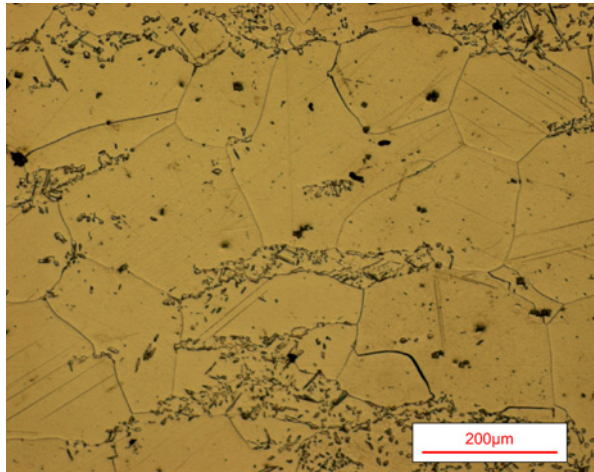
L'analyse chimique et microstructurale du matériau nécessite, au préalable, une préparation de surface. Celle-ci est décrite brièvement à la section suivante.

5.1.2.a Préparation du matériau

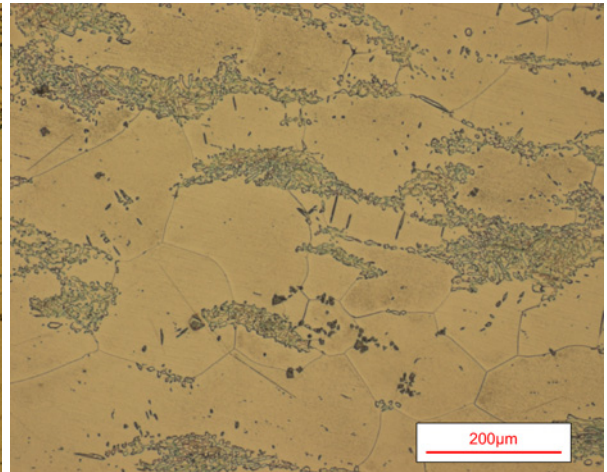
Afin de pouvoir observer la microstructure du matériau au microscope électronique à balayage, nous procédons tout d'abord à un polissage mécanique à l'aide de papiers abrasifs puis de draps de polissages couverts de pâte diamantée présentant une granulométrie de 1µm. L'analyse de la surface par EBSD (Electron Back Scattering Diffraction) nécessite également de s'affranchir de l'écrouissage superficiel introduit ; un polissage électrolytique est donc réalisé sur l'échantillon. La tension utilisée pour ce traitement est de 20V et la solution est constituée de 83.5% de méthanol (CH₃OH) et de 17.5% d'acide sulfurique (H₂SO₄). La température de polissage est de -45°C. L'échantillon est immergé pendant un total de deux minutes par périodes de trente secondes.

Après cette étape, le matériau biphasé présente une microstructure composée d'une phase en creux (l'austénite) et d'une phase en relief (la ferrite).

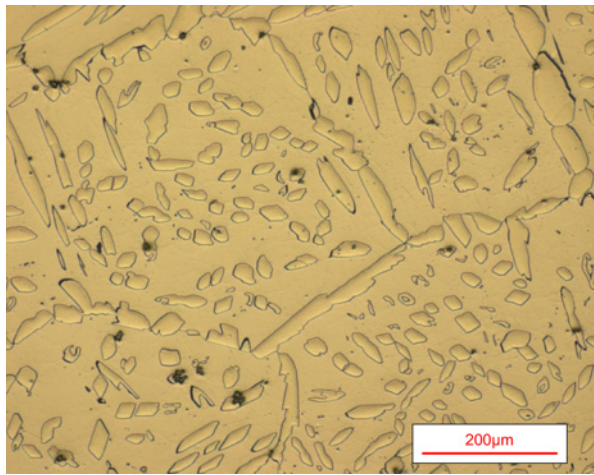
L'échantillon ainsi traité peut être analysé par EBSD afin de caractériser les orientations cristallographiques présentes dans le matériau et par EDX (Energy Dispersive X-ray analysis) dans le but d'estimer la composition chimique des phases. Une autre préparation électro-chimique sera nécessaire si l'on souhaite obtenir un contraste interphase.



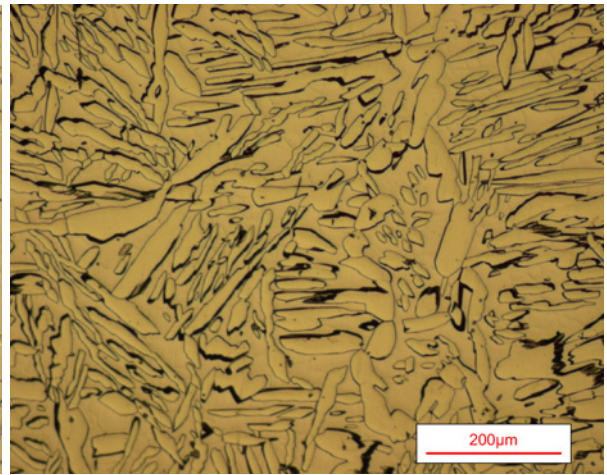
(a) échantillon A (1.5%).



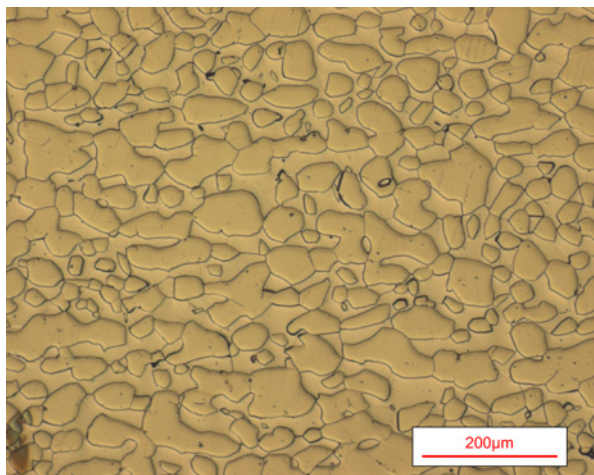
(b) échantillon B (1.5%).



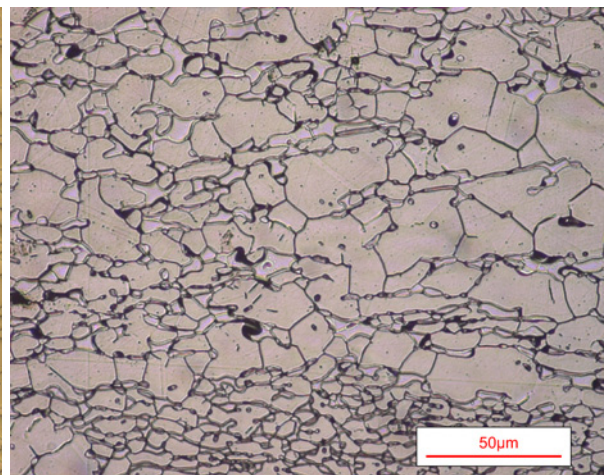
(c) échantillon C (22%).



(d) échantillon E (48%).



(e) échantillon F (60%).



(f) échantillon H (95%).

FIG. 5.3: Microstructures associées aux matériaux de la table 5.1, d'après [27]. Sur ces micrographies optiques, la phase en relief est l'austénite et celle en creux la ferrite. La fraction volumique indiquée entre parenthèses est celle de l'austénite.

Brown a choisi quant à lui un traitement chimique attaquant préférentiellement la phase ferritique. Il s'agit d'un polissage électro-chimique associé à une solution à 60% d'acide nitrique (HNO_3). L'utilisation d'un tel traitement conduit aux microstructures visibles à la figure 5.3.

5.1.2.b Analyse morphologique et cristallographique

La microstructure est représentée dans le cadre de notre modélisation par des fonctions de corrélation (§2.1.1.c) qui peuvent se rapporter aux phases, aux orientations ou encore aux phases généralisées (§3.1.1). Afin d'obtenir ces fonctions de corrélation, il nous faut disposer d'un outil permettant de distinguer ces différentes propriétés en tout point du matériau.

La méthode de l'EBSD fournit un moyen d'atteindre cet objectif, en effet cette procédure permet, à partir de la diffraction des électrons par le réseau cristallin et d'une base de données sur les matériaux, d'identifier le motif diffracté (figure 5.4) et ainsi de déterminer la phase cristallographique et l'orientation du monocristal actuellement sous le faisceau incident du microscope électronique. Nous pouvons donc, à

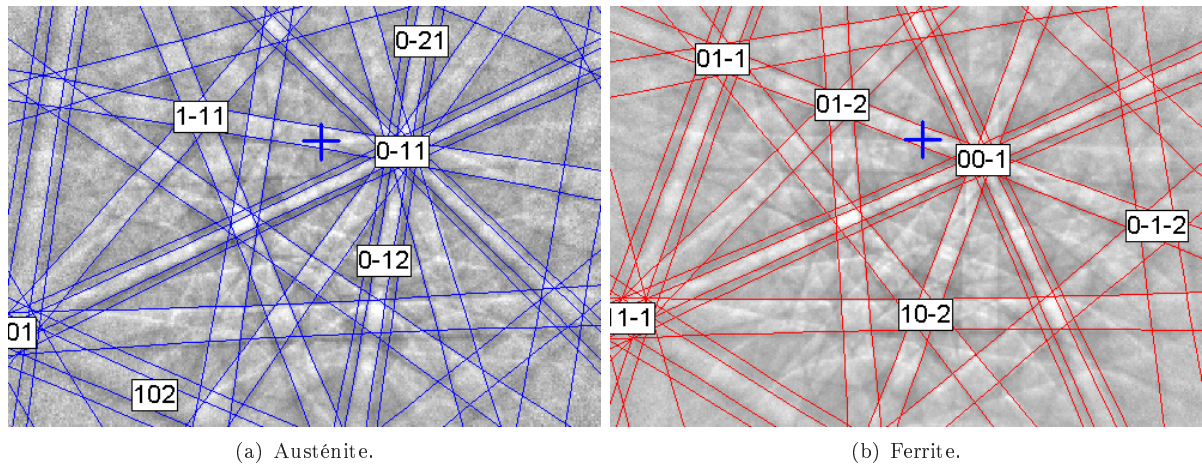


FIG. 5.4: Diagrammes de Kikuchi : motifs obtenus lors de l'intersection des cônes de diffractions avec un plan $[97, 23]$. Ces figures permettent de distinguer ferrite et austénite et de déterminer l'orientation du monocristal considéré.

l'aide de cette méthode, obtenir des cartographies du matériau révélant les phases ou les orientations des grains et donc préciser la répartition de ces caractéristiques.

Nous considérons ici l'analyse de deux zones centrales (figure 5.5) d'un échantillon du matériau G après laminage et traitement thermique (figure 5.6). Sur cette figure la normale aux surfaces observées est la direction de laminage, alors que dans le plan d'observation la grande et la petite dimensions correspondent respectivement à la direction transverse et à la direction normale. La forme de la microstructure suivant d'autres sections du lopin est supposée identique à celle proposée, à la figure 5.7, dans le cas du matériau D.

Analyse des phases

La figure 5.8 présente le type de cartographie des phases qui peut être obtenue par EBSD. Cette information permet d'estimer directement la fraction volumique des phases, c^v , à partir de la fraction de pixels³ appartenant à chaque phase présente sur l'image.

Nous obtenons, respectivement, 67.8% et 65.8% d'austénite sur les microstructures 5.8(a) et 5.8(b), ce qui est supérieur à la fraction prévue et mesurée par Boldetti sur un autre lopin (53%) ayant subi le même traitement. Cette différence notable n'est pas explicable par une déviation de la composition du matériau. Nous verrons que nous trouverons une composition proche de celle estimée par Boldetti sur un autre échantillon. Cette différence d'un lopin à l'autre montre bien la nécessité de vérifier la fraction volumique de phase présente dans les matériaux même lorsque ceux-ci sont issus d'un même lot. Nous

³Toutes les images utilisées dans ce chapitre présentent des pixels carrés.

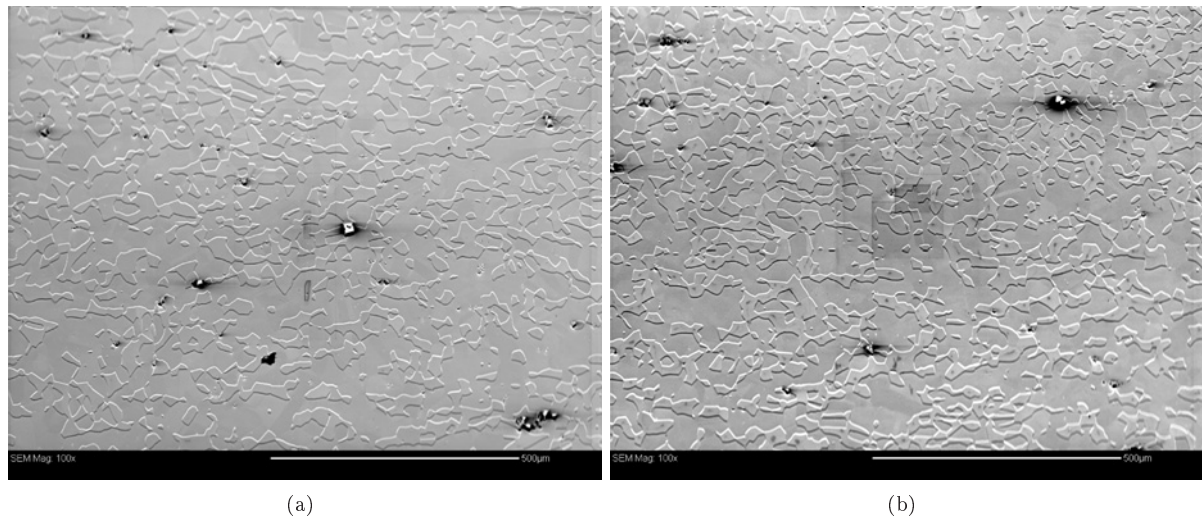


FIG. 5.5: Microstructures du matériau *G* analysées, dans la suite, par *EBSD* : l'horizontale et la verticale sont respectivement les directions transverse et normale du laminage réalisé sur le matériau brut de fonderie.

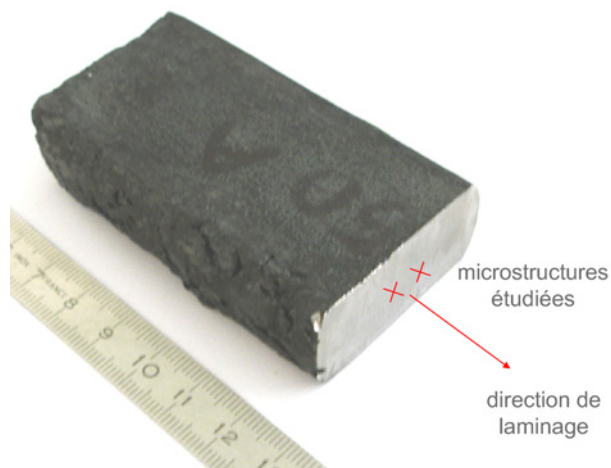


FIG. 5.6: Position des zones analysées sur le lopin laminé et recuit de matériau *G*.

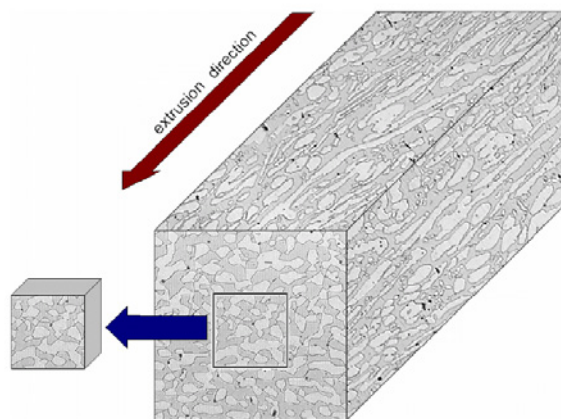


FIG. 5.7: Forme de la microstructure suivant différentes sections d'un lopin extrudé d'après [74].

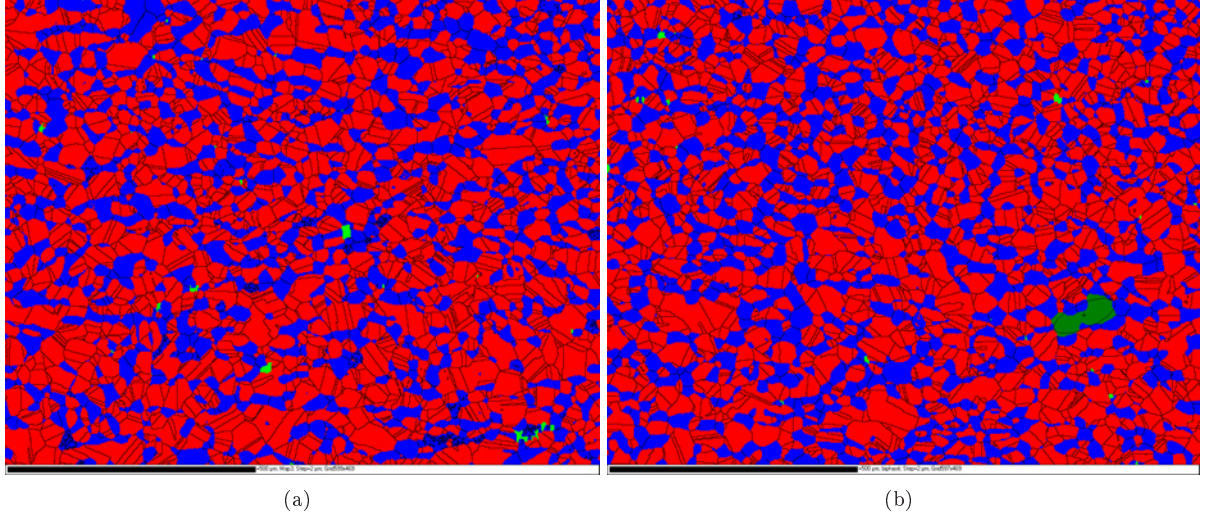


FIG. 5.8: Cartographies des phases obtenues par EBSD pour les microstructures de la figure 5.5.

noterons donc par la suite G' le matériau actuellement considéré.

Pour compléter cette information élémentaire, nous pouvons calculer les fonctions de corrélation à deux points d'appui associées à ces microstructures. Nous avons vu précédemment qu'une seule fonction était nécessaire, dans un cas biphasé, pour définir toute l'information à deux points. Nous considérons donc, par exemple, la fonction d'auto-corrélation de la phase austénitique :

$$C^{\gamma\gamma}(\underline{h}) = \langle \chi^{\gamma}(\underline{x}) \chi^{\gamma}(\underline{x} + \underline{h}) \rangle \quad (5.1)$$

Cette fonction étant une mesure de la corrélation et sachant que cette dernière est totale pour $\underline{h} = 0$ et disparaît pour \underline{h} grand, nous introduisons une version normalisée (variant de 1 à 0) de la fonction de corrélation à deux points définies comme :

$$\bar{C}^{\gamma\gamma}(\underline{h}) = \frac{C_0^{\gamma\gamma}(\underline{h})}{C_0^{\gamma\gamma}(0)} \quad \text{avec} \quad C_0^{\gamma\gamma}(\underline{h}) = \langle (\chi^{\gamma}(\underline{x}) - c^{\gamma})(\chi^{\gamma}(\underline{x} + \underline{h}) - c^{\gamma}) \rangle \quad (5.2)$$

en remarquant l'égalité, $C_0^{\gamma\gamma}(0) = c^{\gamma}(1 - c^{\gamma})$, on peut réécrire l'équation (5.2) sous la forme suivante :

$$\bar{C}^{\gamma\gamma}(\underline{h}) = \frac{1}{c^{\gamma}c^{\alpha}} \langle (\chi^{\gamma}(\underline{x}) - c^{\gamma})(\chi^{\gamma}(\underline{x} + \underline{h}) - c^{\gamma}) \rangle \quad (5.3)$$

On peut remarquer que cette fonction caractérise également l'auto-corrélation de la phase ferritique car :

$$\bar{C}^{\gamma\gamma}(\underline{h}) = \frac{1}{c^{\gamma}c^{\alpha}} \langle [(1 - \chi^{\alpha}(\underline{x})) - (1 - c^{\alpha})][(1 - \chi^{\alpha}(\underline{x} + \underline{h})) - (1 - c^{\alpha})] \rangle = \bar{C}^{\alpha\alpha}(\underline{h}) = \bar{C}(\underline{h}) \quad (5.4)$$

De plus, la donnée de \bar{C} permet facilement de remonter aux fonctions de corrélation du biphasé à partir des expressions (5.5).

$$C^{\gamma\gamma} = c^{\gamma}c^{\alpha}\bar{C}(\underline{h}) + (c^{\gamma})^2 \quad (5.5a)$$

$$C^{\alpha\alpha} = c^{\gamma}c^{\alpha}\bar{C}(\underline{h}) + (c^{\alpha})^2 \quad (5.5b)$$

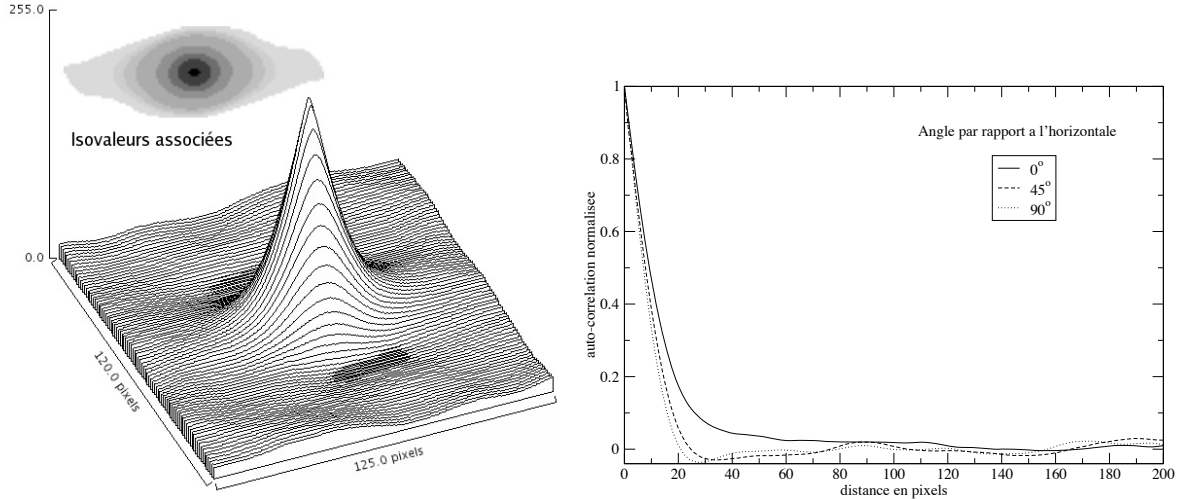
$$C^{\alpha\gamma} = C^{\gamma\alpha} = c^{\gamma}c^{\alpha} [1 - \bar{C}(\underline{h})] \quad (5.5c)$$

Nous noterons que l'obtention de \bar{C} peut être réalisée efficacement en utilisant une transformée de Fourier de l'image (considérée, alors, comme élément de base pour la représentation périodique du matériau) permettant de réduire l'opération de convolution à un produit usuel dans cet espace. En multipliant \bar{C} par 256, on peut associer à la fonction de corrélation normalisée une image en niveaux de gris codée sur 8 bit qui nous donne une représentation de cette fonction et peut nous permettre, à partir de seuillages, de

produire les isovaleurs associées à cette fonction. Nous pouvons également considérer une représentation tridimensionnelle de la fonction comme l'indique la figure 5.9.

L'analyse précédente nous permet donc d'accéder à l'information à deux points caractérisant la répartition des phases cristallographiques et intervenant directement dans nos modèles à deux transitions d'échelles.

La fonction d'auto-corrélation normalisée, dans le cas de la microstructure 5.5(a), est représentée figure 5.9. Celle-ci tend rapidement vers une valeur proche de zéro traduisant une décorrélation de la répartition



(a) Représentation de l'auto-corrélation ramenée sur 256 niveaux de gris. (b) Projection de cette fonction suivant plusieurs directions.

FIG. 5.9: Auto-corrélation normalisée de la phase austénitique, sur ces figures le côté d'un pixel est de $2\mu\text{m}$.

des phases.

A l'aide des seuillages évoqués précédemment, nous pouvons estimer la distance associée à cette décorrélation, en observant, par exemple, à partir de quel seuil l'image n'est plus constituée uniquement d'une tache centrale mais également de taches apparaissant en périphérie de l'image⁴. Nous trouvons alors une distance caractéristique de 40 pixels dans la direction horizontale, ce qui correspond à $80\mu\text{m}$, alors que pour la direction verticale la taille caractéristique est de $40\mu\text{m}$. Bien que supérieures à la dimension moyenne des grains dans les différentes directions, comme nous le verrons à la section suivante, ces dimensions restent d'un ordre de grandeur comparable. Cette observation signifie que les phases sont fortement désordonnées dès l'échelle des grains et que les domaines de phase, dans cette configuration particulière, coïncident avec les grains du matériau ou avec des regroupements de quelques grains.

Il est en outre remarquable de s'apercevoir que les isovaleurs de la fonction d'auto-corrélation ont des formes quasi-elliptiques (le rapport grand axe sur petit axe valant environ 1.5), le grand axe étant aligné avec l'horizontal de la micrographie 5.8(a). Ces ellipses sont pratiquement homothétiques jusqu'à la décorrélation. Cette observation permet de justifier, en première approximation, l'hypothèse de "symétrie ellipsoïdale" à l'échelle de la répartition des phases qui sera faite systématiquement par la suite, lors des simulations.

Analyse des orientations

Nous avons proposé précédemment (chapitre 3) deux descriptions du polycristal biphasé, à partir d'une approche à deux transitions d'échelles ou en considérant des phases généralisées.

Dans le cadre de l'approche à deux transitions d'échelles l'information nécessaire à la description du matériau est donnée d'une part par la fonction \bar{C} , dont la méthode d'obtention a été éclaircie au paragraphe ci-dessus et d'autre part au travers de la description de la répartition des orientations par phase. Dans le cadre de la méthode de redéfinition des phases, par contre, l'information élémentaire couple phase

⁴Une autre taille caractéristique pourrait être obtenue en considérant la distance pour laquelle l'auto-corrélation change de signe pour une direction donnée.

cristallographique et orientation.

L'EBSD nous permet d'obtenir une cartographie du matériau par orientation, information qui peut être vue globalement ou bien phase par phase (figures 5.10 et 5.11). Ces cartographies sont souvent tracées en associant à chaque angle d'Euler, donnant l'orientation du monocristal dans le repère lié au microscope, une composante RGB⁵ codée de 0 à 255.

A partir de ces données, il est possible d'obtenir les fractions volumiques d'orientation⁶ par phase, $c_{|\varphi}^g$,

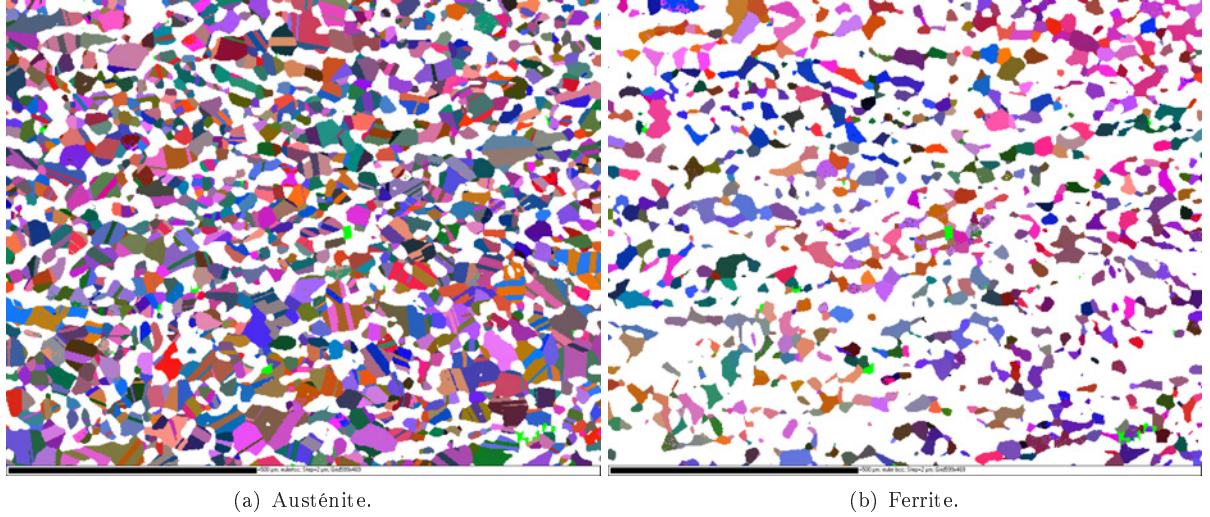


FIG. 5.10: Cartographie d'orientation pour chacune des phases de la figure 5.5(a).

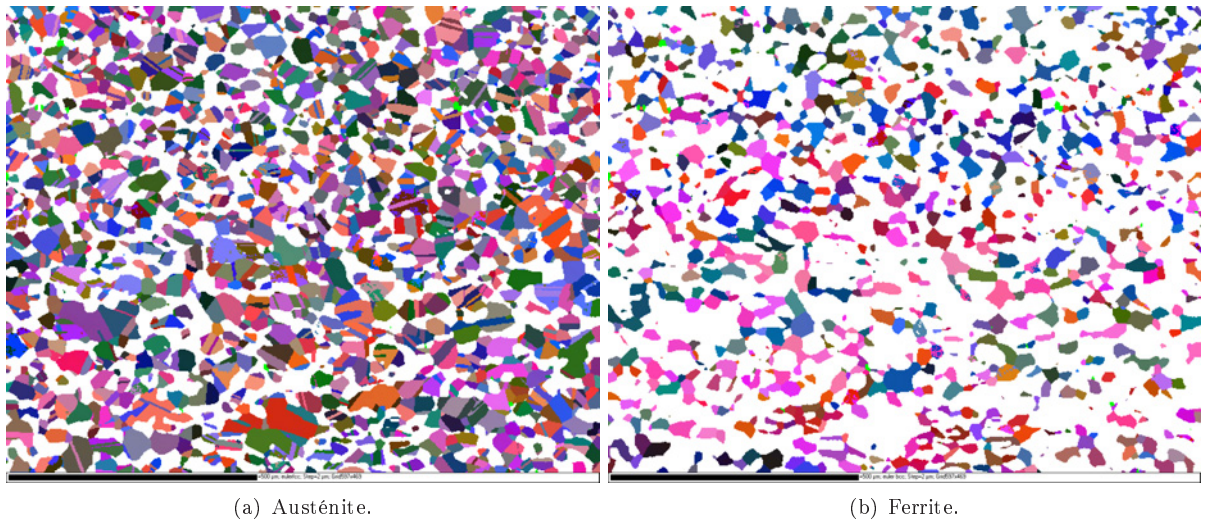


FIG. 5.11: Cartographie d'orientation pour chacune des phases de la figure 5.5(b).

définissant la texture cristallographique de la phase. Cette information est représentée classiquement sous la forme d'une projection stéréographique⁷ des normales à des familles de plans particulières, où la densité d'orientation est indiquée sous la forme d'une échelle de couleurs. Les figures 5.12 et 5.13 présentent les textures cristallographiques de chaque phase pour les deux zones considérées précédemment. Les textures obtenues sont assez peu marquées pour les deux phases même si la ferrite présente une répartition plus

⁵RGB : Red Green Blue, chacune de ces trois couleurs composant l'image est associée à l'un des angles d'Euler (ϕ_1, φ, ϕ_2).

⁶Il s'agit en fait de caractérisations d'ensembles de monocristaux présentant des orientations proches les uns des autres.

⁷D'autres représentations sont également très utilisées, on pourra se reporter à [28, 3] ou [97] pour une discussion de ces méthodes.

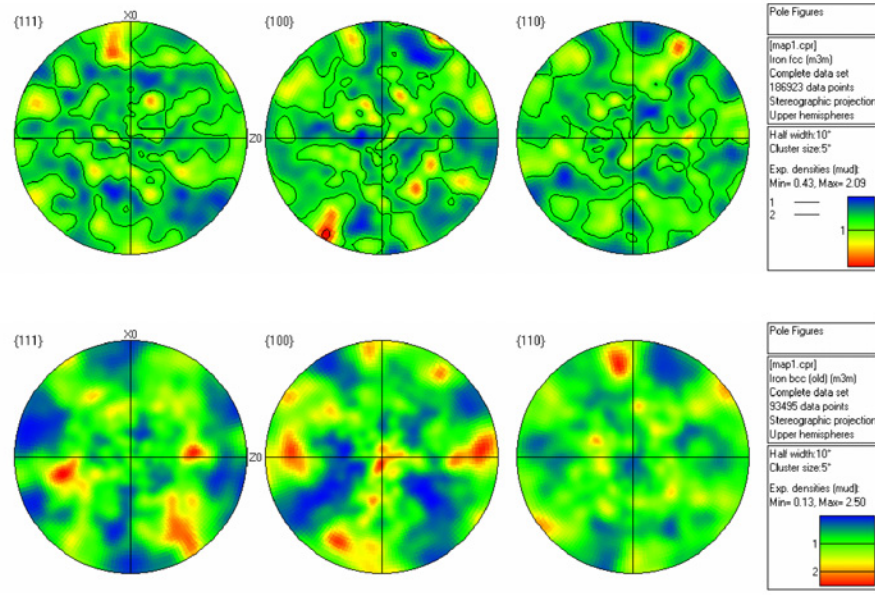


FIG. 5.12: Texture de chacune des phases de la microstructure 5.5(a) (en haut l'austénite, en bas la ferrite). (X_0 étant la direction normale et Z_0 étant la direction transverse du laminage pour le lopin présenté à la figure 5.6).

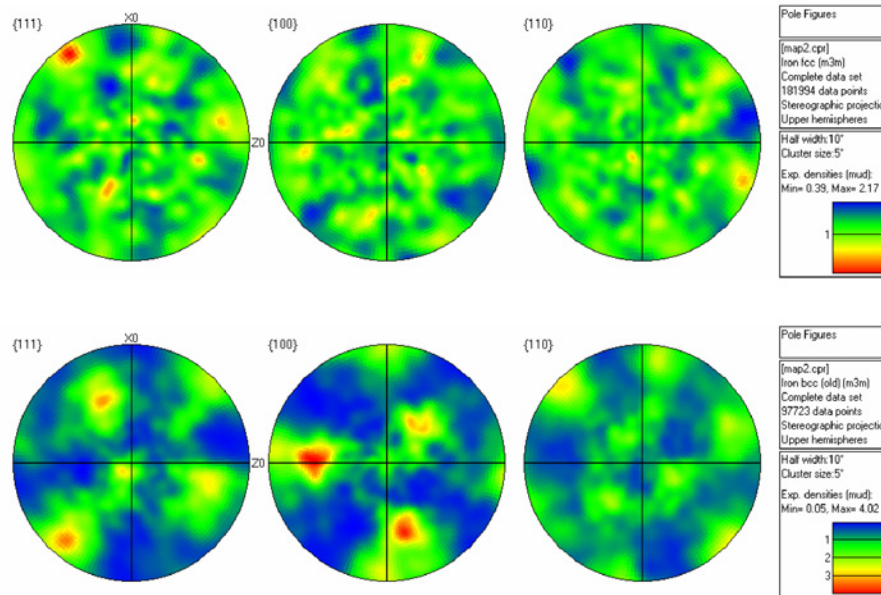


FIG. 5.13: Texture de chacune des phases de la microstructure 5.5(b) (en haut l'austénite, en bas la ferrite). (X_0 étant la direction normale et Z_0 étant la direction transverse du laminage).

hétérogène mais difficile à identifier.

Nous notons ici que le grand nombre d'orientations rend complexe la représentation d'une information aussi simple que l'information statistique à un point d'appui. Cette observation laisse présager des difficultés qui apparaissent lorsque l'on souhaite étendre la description des orientations en termes d'information à deux points.

En effet, une première difficulté réside dans le fait que les fonctions de corrélation à deux points sont des mesures directionnelles, nécessitant une connaissance du matériau dans le volume. Cette caractérisation est actuellement impossible à obtenir par une procédure traditionnelle sans enlèvement de matière. En imaginant pouvoir s'affranchir de cette limitation, en utilisant par exemple des hypothèses sur les symétries de cette fonction ou des mesures sur des coupes différentes, il reste la difficulté d'obtenir un EMR pour les orientations considérées et le fait qu'il est maintenant nécessaire de déterminer non seulement les fonctions d'auto-corrélation de chaque orientation mais en plus les corrélations croisées pour chaque paire d'orientations différentes. Bien que réalisable, cette analyse nécessite des moyens adaptés dont nous ne disposons pas actuellement au laboratoire. Certains auteurs s'intéressent néanmoins à ces questions, nous citerons par exemple les travaux de [122, 14], où une procédure d'estimation de l'information à deux points a été proposée et utilisée dans le cas de polycristaux monophasés.

En laissant de côté cette caractérisation très lourde de la microstructure à N phases, on peut s'intéresser à une approche simplifiée basée sur d'autres informations fournies par l'analyse EBSD de la microstructure. Nous avons noté à la remarque du §2.2.2.b le lien qui pouvait parfois être établi entre la description de la symétrie de répartition des orientations et la forme moyenne des grains dans le matériau. Nous allons considérer, dans la suite, que ce lien est vérifié⁸ et nous allons donc chercher à caractériser la forme moyenne des grains dans le matériau.

Un histogramme en nombre de la taille de grain (diamètre du cercle de même surface), obtenu à partir des données issues de l'EBSD, exhibe un pic initial pour les très petits grains de quelques pixels. Un tel phénomène s'explique par le fait que le logiciel associé à l'EBSD considère comme grain tout ensemble contigu de pixels de même orientation, à quelques degrés près (ici 10°). L'existence d'erreurs d'indexation va donc générer des petits grains parasites n'ayant pas de réalité physique mais entrant dans cette comptabilisation. Afin d'éviter cet écueil nous considérerons une autre définition de la taille de grains. Cette définition se base sur le fait que la probabilité de rencontrer un grain sur la micrographie en choisissant un point quelconque de celle-ci est égale à la fraction surfacique de ce grain. Nous pouvons alors tracer la fonction de répartition de taille des grains sur les deux microstructures considérées (figures 5.10 et 5.11) et pour chacune des phases (figure 5.14). L'un des avantages de ce type de représentation par rapport

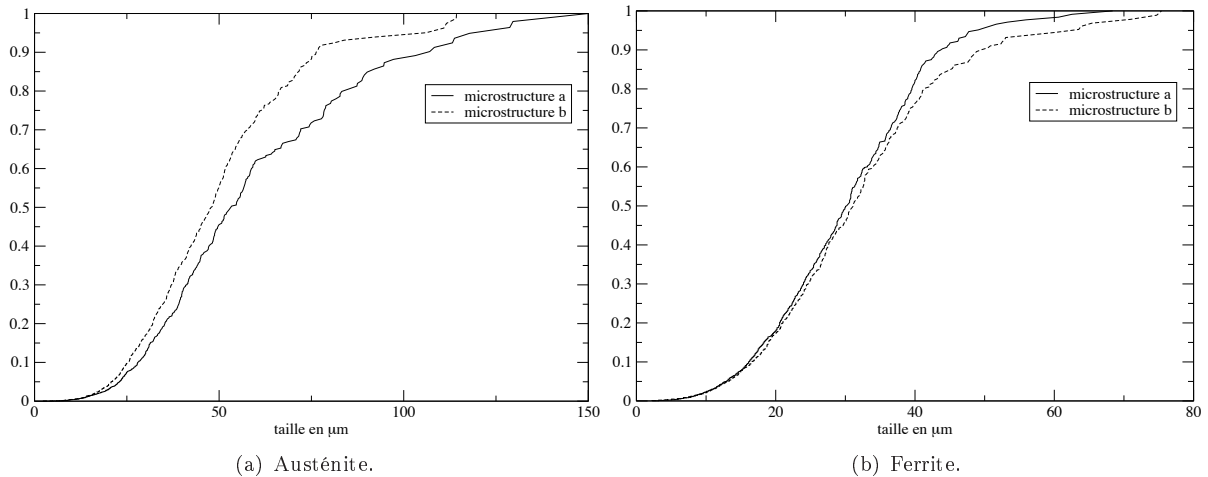


FIG. 5.14: Fonctions de répartition des tailles de grains de chaque phase pour les deux microstructures analysées (figure 5.5).

au tracé classique, en nombre, de l'histogramme de taille de grain est de ne pas donner un poids trop

⁸Cette hypothèse semble être justifiée car nous avons dans l'idée que la décorrélation des orientations doit apparaître plus rapidement que celle des phases cristallographiques, or nous avons remarqué précédemment que la décorrélation de \bar{C} intervenait pour une distance d'un ordre de grandeur comparable à la taille de grain.

		$d(\mu\text{m})$	f	$a(\mu\text{m})$	$b(\mu\text{m})$
microstructure (a)	Austénite	60.7	1.78	22.7	40.5
	Ferrite	32.6	1.8	12.1	21.9
microstructure (b)	Austénite	50.6	1.71	19.3	33.1
	Ferrite	30.5	1.74	11.6	20.1

TAB. 5.2: Tableau récapitulatif des tailles moyennes de grains (diamètre, rapport de forme, demi-petit axe, demi-grand axe) pour les deux microstructures considérées à la figure 5.5. Les moyennes sont prises au sens introduit précédemment.

important aux pixels erronés liés à des erreurs d'indexation.

Nous obtenons respectivement pour la microstructure 5.10 et la microstructure 5.11 une taille de grain moyenne d de 60.7 et 50.6 μm pour l'austénite et de 32.6 et 30.5 μm pour la ferrite. On a donc des grains austénitiques sensiblement plus gros que les grains ferritiques.

Nous pouvons également caractériser la forme moyenne de ces grains en considérant l'ensemble des ellipses de même surface et approchant au mieux la forme de chaque grain. Le rapport de forme moyen f (rapport du grand axe par le petit axe) de ces ellipses est de 1.78|1.71 et de 1.8|1.74 respectivement pour l'austénite et la ferrite (microstructure a|microstructure b). La dimension a du demi-petit axe de l'ellipse austénitique moyenne est donnée par $2a = d/\sqrt{f}$ et celle du demi-grand axe b par $2b = d\sqrt{f}$. Les dimensions moyennes des grains, au sens introduit précédemment, sont alors résumées à la table 5.2. L'angle moyen (en valeur absolue⁹) du grand axe des ellipses par rapport à la direction horizontale de la figure 5.5 est de 31°|30° pour l'austénite et de 34°|34° pour la ferrite. En considérant la moyenne de ces angles lorsqu'ils sont définis entre -90° et 90°, on obtient des résultats proches de 0°. Ces deux observations suggèrent que les grains sont plutôt allongés dans la direction horizontale qui est la direction transverse du laminage. Les fonctions de répartition pour les deux phases confirment cette tendance (figure 5.15). La

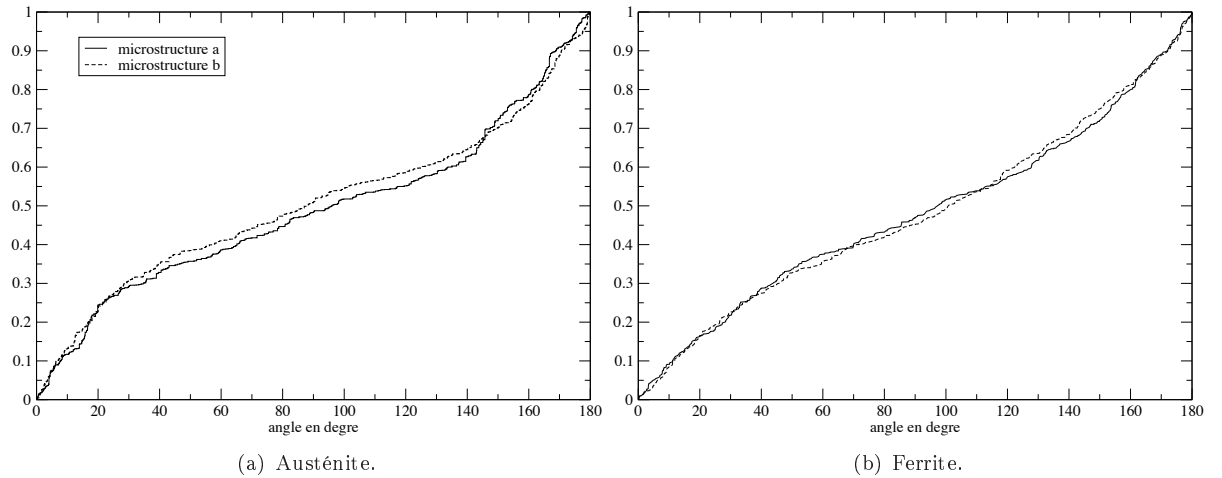


FIG. 5.15: Orientation, par rapport à la direction transverse du laminage, du grand axe de l'ellipse approchant au mieux la forme des grains de chaque phase pour les deux microstructures analysées (figure 5.5).

symétrie de distribution des phases coïncide donc assez bien avec la forme des grains, ce qui est cohérent avec le fait que ces deux propriétés sont induites par l'histoire thermo-mécanique du matériau.

Remarque 1 : Lien entre f et $\underline{\underline{Z}}$

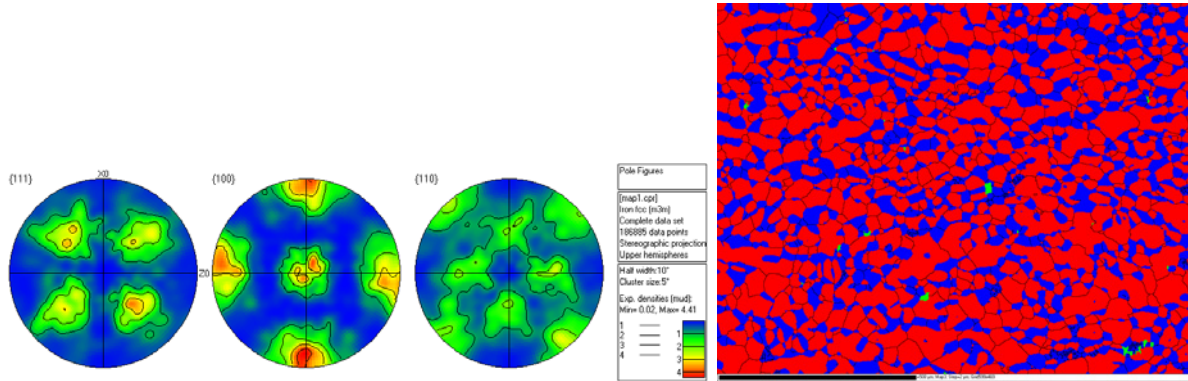
La forme de grain décrite à travers les paramètres précédents peut être mise en relation avec le tenseur microstructural $\underline{\underline{Z}}$, relatif à la symétrie de répartition des familles d'orientations. Néanmoins, l'ellipse définie par $\underline{\underline{Z}}$ dans le plan d'étude présentera un rapport de forme sans doute bien plus faible que celui

⁹Cet angle peut prendre des valeurs de 0° à 90° en considérant équivalentes des orientations de θ et de $-\theta$.

présenté à la table 5.2. En effet, \underline{Z} représente une “moyenne de la forme des grains” dans un repère donné alors que f est la moyenne des rapports de forme des ellipses approchant au mieux les grains (et donc calculé dans leurs axes principaux). La différence entre ces deux termes sera donc d’autant plus marquée que les ellipses modélisant les grains auront des orientations variées. A titre d’illustration, on pourrait vérifier que des ellipses de rapport de forme donné, présentant une répartition isotrope de leur centre et des orientations aléatoires seraient caractérisées par un tenseur microstructural associé à un cercle.

Remarque 2 : Présence de macles dans la phase austénitique

Nous pouvons noter la présence de macles dans la phase austénitique. La suppression de ces macles conduit à une texture cube marquée dans l’austénite comme indiquée sur la figure 5.16. La présence de macles homogénéise donc fortement la texture. Les orientations ainsi révélées sont caractéristiques du



(a) Texture obtenue dans l’austénite après réorientation des macles (X_0 étant la direction normale et Z_0 étant la direction transverse du laminage). (b) Microstructure 5.5(a) après suppression des macles.

FIG. 5.16: Observations microstructurales après suppression des macles.

traitement thermique subi par le matériau comme le montre la figure 5.17 décrivant l’évolution de la texture d’un matériau CFC laminé au cours d’un recuit.

5.1.2.c Composition chimique des phases

Nous avons précédemment caractérisé le matériau vis-à-vis de ses phases et de ses orientations, il nous faut également nous assurer que la composition chimique annoncée est bien celle que l’on retrouve dans l’échantillon et que ces concentrations sont quasiment homogènes dans chaque constituant. Pour cela, nous allons utiliser la sonde EDX dont est équipé le microscope électronique à balayage afin de déterminer quantitativement¹⁰ la composition du matériau en plusieurs points. Une dizaine de mesures ponctuelles sont réalisées dans chaque phase et on choisit de faire quelques mesures à un grandissement plus faible afin de déterminer la composition chimique globale de l’acier biphasé. Les résultats de ces mesures sont reportés dans la table 5.3. La précision absolue, liée à l’étalonnage, ne peut excéder 1% ainsi les décimales fournies par le tableau 5.3 n’ont de sens que pour la quantification des fluctuations spatiales. Les valeurs obtenues sont en accord avec les mesures réalisées par Boldetti sur un autre lopin obtenu par la même procédure et présentées dans le tableau 5.1. De plus, les fluctuations de teneur dans les différents composants se révèlent très faibles et en assez bon accord avec le diagramme ternaire de [170] qui prévoit une ferrite et une austénite présentant respectivement un ratio Cr/Ni de 35/8 et de 27/17.

5.1.3 Bilan

Cette section a permis de présenter des méthodes et des mesures fournissant des données susceptibles d’être exploitées directement par nos modèles.

L’application de ces analyses à l’un des matériaux intervenant dans cette étude nous a permis également

¹⁰Cette détermination nécessite un étalonnage sur des matériaux de référence.

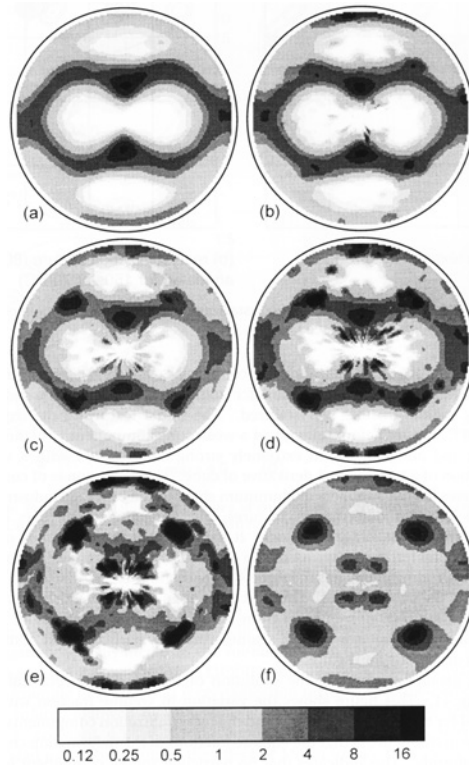


FIG. 5.17: Figures de pôles (“equal-area projection”) associées aux plans 111, pour un matériau cubique à faces centrées subissant un recuit, la fraction recristallisée étant de (a) 0, (b) 11, (c) 45, (d) 71, (e) 91 et (f) 100%, d’après [97] (direction de laminage verticale, direction transverse horizontale).

d’obtenir des informations sur la microstructure des aciers inoxydables après laminage et traitement thermique. Il apparaît que les phases et les grains présentent des formes légèrement allongées dans la direction transverse et que la texture dans chacune des phases est relativement peu marquée. Nous avons pu noter également que l’hypothèse de symétrie ellipsoïdale de la répartition des phases semblait être acceptable dans le cas de ce matériau.

L’analyse chimique du matériau a validé les concentrations prévues par Boldetti. Mais nous avons pu remarquer, par contre, des fractions de phases différentes de celles annoncées par l’auteur ce qui suggère la possibilité d’une erreur, lors du traitement thermo-mécanique du lopin en question.

		fraction massique (%)				fraction atomique (%)			
		Fe	Cr	Ni	Si	Fe	Cr	Ni	Si
Acier	Moyenne	57.24	30.73	11.88	0.15	56.2	32.4	11.1	0.3
	Ecart type	0.14	0.22	0.35	0.05	0.1	0.22	0.33	0.08
Austénite	Moyenne	58.39	27.43	13.9	0.28	57.45	28.98	13.01	0.55
	Ecart type	0.08	0.37	0.27	0.08	0.04	0.39	0.24	0.17
Ferrite	Moyenne	55.84	36.25	7.59	0.33	54.4	37.93	7.04	0.65
	Ecart type	0.02	0.33	0.33	0.01	0.05	0.32	0.3	0.04

TAB. 5.3: Analyse EDX du matériau et de ses constituants.

5.2 Comportement macroscopique et évolution microstructurale

La section précédente nous a fourni une partie des données nécessaires à nos simulations. Il nous manque néanmoins la donnée du comportement des constituants du matériau. Cette partie vise à nous fournir cette information et à nous permettre d'obtenir des résultats qui pourront être comparés avec les sorties des modèles ; à savoir l'écoulement macroscopique des biphasés et l'évolution microstructurale du matériau lorsque celui-ci est soumis à une compression plane. Cette dernière caractérisation utilisera les méthodes proposées à la section précédente.

La caractérisation d'aciers à haute température est réalisée, en général, en utilisant des essais de compression plane, de compression axisymétrique ou de torsion. Ces essais de laboratoires sont classiquement employés car ils permettent de réaliser, de façon reproductible, des niveaux de sollicitation proches de ceux rencontrés lors de la mise forme du matériau. Nous allons présenter brièvement les essais mécaniques utilisés dans le cadre de ce travail, avant de discuter les résultats obtenus pour les phases pures et pour les matériaux biphasés. Ces données seront à la base de l'identification des paramètres d'écrouissage pour les phases pures et constitueront, dans le cas biphasé, une information de référence permettant la comparaison des réponses macroscopiques expérimentales avec celles fournies par nos modèles.

5.2.1 Essai de bipoinçonnement

L'essai principalement employé dans ce travail est l'essai de compression plane noté PSC (Plane Strain Compression) et aussi appelé essai de bipoinçonnement. Cet essai de compression modifié, proposé par Orowan [142], a pour but de simuler l'écoulement du matériau au cours du laminage. Sa représentation schématique est donnée à la figure 5.18. Lorsque les dimensions w et h sont bien plus petites que b l'état de déformation peut être considéré comme plan car le matériau est retenu dans la direction b . Dans cette situation, en faisant un parallèle avec la sollicitation dans le cas du laminage, b est assimilable à la direction transverse (DT) parallèle à l'axe des cylindres de laminage alors que h et w correspondent, respectivement, aux directions normale (DN) et de laminage (DL).

L'objectif de cet essai est de caractériser le comportement mécanique du matériau. Pour ce faire, un certain

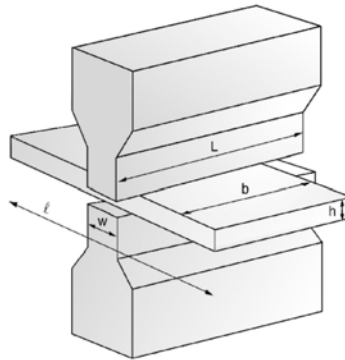


FIG. 5.18: Représentation schématique de l'essai de déformation plane d'après [121].

nombre de corrections doivent être réalisées sur les données forces/déplacements issues de l'essai. Il est nécessaire de prendre en compte en particulier : la raideur de la machine, le frottement outil/échantillon, les dilatations thermiques, la planéité imparfaite de l'état de déformation et les vibrations de la machine (à grandes vitesses). A ces corrections s'ajoutent évidemment des facteurs parasites plus difficiles à prendre en compte, le plus important étant sans doute la perte de symétrie de la déformation, la géométrie en Z (figure 5.19(a)) étant plutôt liée à un mauvais alignement initial des outils, alors que la déformation en U (figure 5.19(b)) s'apparente plus à une hétérogénéité de frottement entre les deux faces de l'échantillon. Ces contributions peuvent être reproduites à l'aide d'outils numériques ([18] par exemple) comme le montre la figure 5.19. Ces phénomènes n'ont pas été rencontrés pour les essais présentés lors de cette étude.

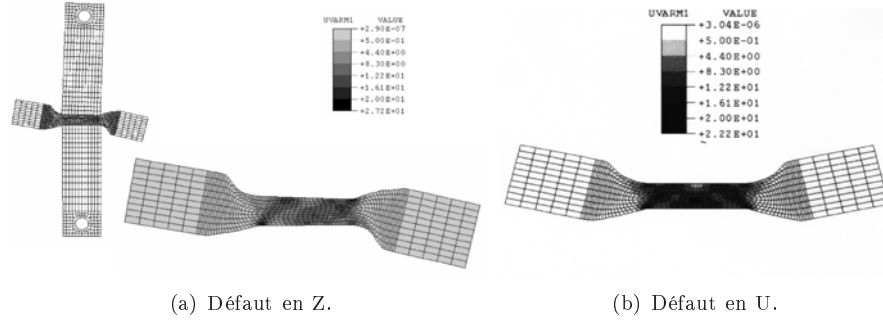


FIG. 5.19: Défauts pouvant apparaître au cours de l'essai de compression plane.

5.2.2 Corrections appliquées

Brown [27] a utilisé une procédure de dépouillement assez standard basée sur des estimations analytiques des termes correctifs à appliquer. Le détail de la méthode peut être trouvé dans [121]; nous ne donnerons ici que les grandes lignes de la démarche. Un exemple de courbe force/déplacement associée à la courbe contrainte/déformation logarithmique en intégrant ces corrections est présenté figure 5.20.

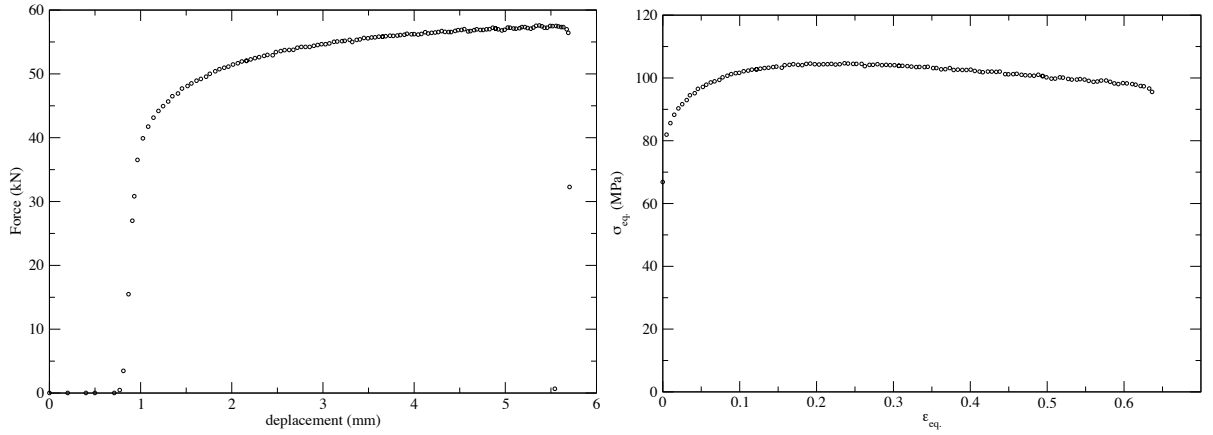


FIG. 5.20: Passage des données Force/Déplacement aux caractérisations en contrainte et déformation équivalentes pour le matériau F sollicité à 1050°C à une vitesse de 1s⁻¹.

Raideur de la machine : On corrige l'origine de la déformation qui peut être décalée du fait de jeux ou de la lubrification. On modifie également la première partie de la courbe de réponse constituée d'une courte zone non linéaire suivie d'une pente caractéristique d'une élasticité. La zone non linéaire initiale est liée à la lubrification alors que la pente initiale caractérise la mise en charge du système et intègre donc la raideur de la machine.

Étalement dans la direction b : Sellars [181, 183] a obtenu une loi phénoménologique pour prévoir ce phénomène en fonction d'un paramètre d'étalement C_b qui est déterminé à partir des caractéristiques géométriques initiales (h_0, b_0) et finales (h_f, b_f) de l'échantillon. En supposant le paramètre constant pour toute valeur intermédiaire de b et h , nous pouvons estimer la valeur de l'étalement de b au cours de l'essai en utilisant la relation (5.6).

$$C_b = \frac{b/b_0 - 1}{1 - (h/h_0)^{0.5}} \quad (5.6)$$

L'hypothèse d'incompressibilité du matériau nous permet d'exprimer la déformation logarithmique

équivalente à travers les relations :

$$\varepsilon_{\text{eq.}} = \sqrt{\frac{2}{3}(\varepsilon_I^2 + \varepsilon_{II}^2 + \varepsilon_{III}^2)} = \frac{\sqrt{2}}{3} \sqrt{(\varepsilon_I - \varepsilon_{II})^2 + (\varepsilon_{II} - \varepsilon_{III})^2 + (\varepsilon_{III} - \varepsilon_I)^2} \quad (5.7)$$

avec $\varepsilon_{III} = \ln\left(\frac{h}{h_0}\right)$; $\varepsilon_I = \ln\left(\frac{b}{b_0}\right)$; $\varepsilon_{II} = -\varepsilon_I - \varepsilon_{III}$

A partir de cette expression et de la relation (5.6), un facteur F tel que : $\varepsilon_{\text{eq.}} = -F\varepsilon_{III}$, peut être introduit. On remarquera que F est unitaire lorsque $\varepsilon_I = \varepsilon_{II}$ (cas axisymétrique) et qu'il vaut $2/\sqrt{3}$ dans le cadre d'un essai parfaitement plan ($\varepsilon_{III} = -\varepsilon_{II}$). Ce facteur est utilisé afin de calculer la déformation équivalente logarithmique lors du post-traitement. Mais, afin d'imposer la vitesse de déformation équivalente au cours de l'essai, un facteur simplifié F' doit être introduit. En effet, C_b est inconnu au cours de la sollicitation et, de plus, la machine ne dispose pas d'un contrôleur suffisamment rapide pour évaluer un logarithme en temps réel, ainsi l'expression (5.8) est utilisée.

$$\dot{\varepsilon}_{\text{eq.}} = -F' \cdot \dot{\varepsilon}_{III} \quad \text{avec} \quad F' = \frac{1}{b_0} \left[\frac{2}{\sqrt{3}} (b_0 - w) + w \right] \quad (5.8)$$

Nous avons noté précédemment que la planéité de la déformation était liée à l'importance de la dimension b ; c'est bien sur ce critère qu'est construit F' , car pour $b_0 = w$, situation où DT et DL sont équivalentes on retrouve $F' = 1$ alors que, lorsque $b_0 \gg w$, F' tend vers $2/\sqrt{3}$.

La composante hors plan de la déformation influant également sur la surface de contact, elle doit être prise en compte dans le calcul de la contrainte de Cauchy.

Frottement outil/échantillon : La contrainte équivalente doit être modifiée par la prise en compte du glissement entre l'outil et la matière. Trois régimes peuvent être distingués : un régime où toute la surface de contact est le siège du phénomène de frottement, un régime de frottement partiel où seule une partie de la zone de contact frotte et un régime d'adhérence où la cinématique est entièrement accommodée par la déformation du matériau. L'estimation de la contrainte équivalente est obtenue en utilisant les expressions analytiques de Silk et van der Winden [184] basées sur les travaux de [174] et [143].

5.2.3 Résultats pour les phases pures

Dans cette section nous allons présenter le dépouillement des résultats expérimentaux obtenus par Brown [27] sur le comportement macroscopique des polycristaux monophasés austénitiques et ferritiques. Ces données seront utilisées par la suite au chapitre 6 en association avec un modèle polycristallin, afin de déterminer les paramètres d'écrouissage de chacune des phases du matériau. Ces paramètres nous permettront ensuite de modéliser le comportement des polycristaux biphasés en faisant l'hypothèse que ces paramètres d'écrouissage restent pertinents lorsque l'on passe du polycristal monophasé au polycristal biphasé.

Lors de ces essais de compression plane le matériau est sollicité à la température de 1050°C. Cette température est atteinte en deux minutes à l'aide d'une boucle d'asservissement constituée d'un thermocouple et d'un dispositif de chauffage par induction. Le matériau est laissé deux minutes supplémentaires à la température d'essai pour s'assurer de la stabilité et de l'homogénéité de la température. On notera que celle-ci est choisie dans le domaine où les frontières interphases du diagramme d'équilibre sont quasi-verticales (figure 5.1(b)) afin d'éviter qu'il y ait évolution du matériau lors de la mise en température. Trois vitesses de déformation équivalente sont employées durant ces essais : 0.1, 1 et 10s⁻¹. Les courbes post-traitées en utilisant la procédure esquissée précédemment sont données à la figure 5.21(a) pour les matériaux ferritiques et à la figure 5.21(b) pour le matériau austénitique.

Conformément à ce qui a déjà été vu au chapitre 1, concernant le comportement de l'austénite et de la ferrite à haute température, on retrouve le comportement pratiquement plastique parfait de la ferrite et l'écrouissage plus progressif de l'austénite¹¹.

¹¹La figure 5.21(b) présente deux écoulements pour une vitesse de 1s⁻¹ car Brown a répété cet essai. La distance entre ces deux courbes nous donne une mesure de l'incertitude (de l'ordre de 6%) liée à l'obtention des courbes d'écoulement macroscopiques.

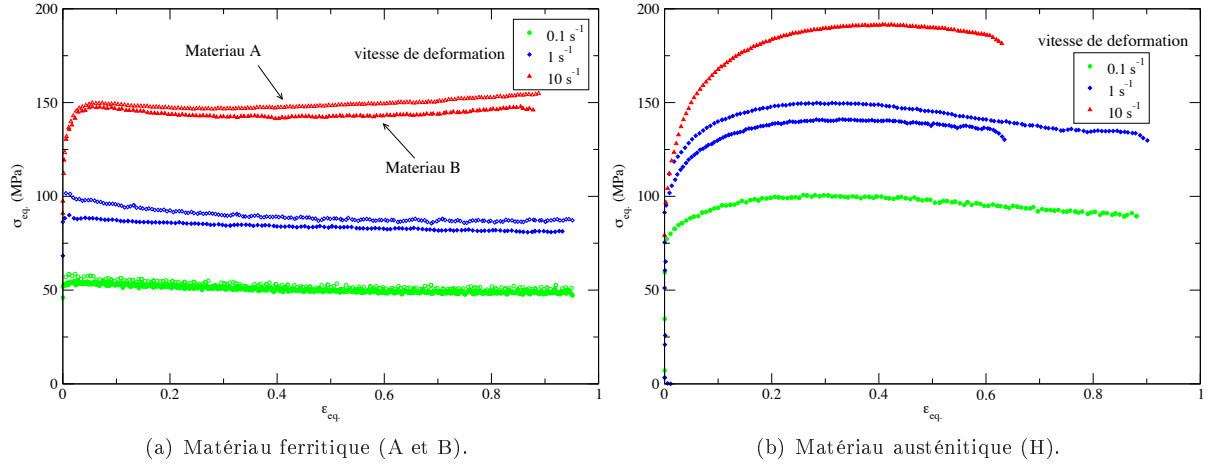


FIG. 5.21: Comportement des phases pures obtenu par [27] pour une température de 1050°C.

5.2.3.a Identification des exposants viscoplastiques

Comme nous l'avons vu, les données présentées à la section précédente vont jouer un rôle important dans la suite du travail car ce sont elles qui vont être approchées afin de modéliser le comportement de la ferrite et de l'austénite dans nos simulations. Avant d'ajuster, au chapitre suivant, les paramètres de la loi d'écrouissage à proprement parler, il nous faut déterminer l'exposant viscoplastique n qui lie la vitesse de glissement le long des plans réticulaires et la cisssion résolue. Nous avons rappelé au §2.2.2 que l'homogénéité des potentiels se conservait en passant à l'échelle du polycristal. Ainsi l'exposant n va lier la vitesse de déformation équivalente à la contrainte équivalente, comme le prédit la loi de Sellars et Tegart à faible contrainte. On peut donc prédire cet exposant en traçant, à état de structure constant, le logarithme de la contrainte en fonction du logarithme de la vitesse de déformation. Cet état de structure constant est considéré atteint lors de l'établissement d'un palier en l'absence de recristallisation ou à l'apparition d'un pic lorsque la recristallisation dynamique a lieu.

Une autre méthode d'identification de n est également proposée dans la littérature [51] ; elle consiste à identifier une contrainte d'écoulement moyenne jusqu'à l'état stationnaire (ou après le pic) et permet donc d'éviter les indéterminations liées au choix parfois approximatif de l'état de structure constant. Cette contrainte est donnée par :

$$\sigma_{MF} = \frac{1}{\epsilon_{MF}} \int_0^{\epsilon_{MF}} \sigma de \quad (5.9)$$

où ϵ_{MF} doit appartenir au régime permanent. D'autres méthodes basées sur des essais ou des dépouillements spécifiques sont reportées dans [150] ou [187] par exemple.

A partir des données présentées figures 5.21 nous cherchons à identifier les exposants viscoplastiques de la ferrite et de l'austénite. Dans le cas de la ferrite pure, cette identification est facile du fait du comportement pratiquement plastique parfait de la ferrite. Il suffit de déterminer la valeur de n_{CC} à l'aide de la figure 5.22 (ici $n_{CC}=4.4$).

Dans le cas de l'austénite, les choses sont plus complexes car le niveau de contrainte évolue avec la déformation, la contrainte à état de structure constant n'est donc pas facilement identifiable. On se propose alors d'utiliser les deux méthodes d'identification de n présentées précédemment. La méthode classique qui nécessite d'identifier une valeur de contrainte de référence et la méthode de l'état équivalent proposée par Duprez [51] et basée sur une contrainte moyennée. L'identification de n est représentée figure 5.23(a) dans le cadre de la première méthode et figure 5.23(b) lors de l'utilisation de la méthode de [51]. Ces démarches conduisent respectivement à des valeurs de 6.9 et 7.5 pour n_{CFC} . Ces valeurs d'exposant sont cohérentes avec celles proposées par [149, 65] ($n_{CC} = 4.8$, $n_{CFC} = 6.7$) à partir d'autres données expérimentales [4] sur la même famille de matériau.

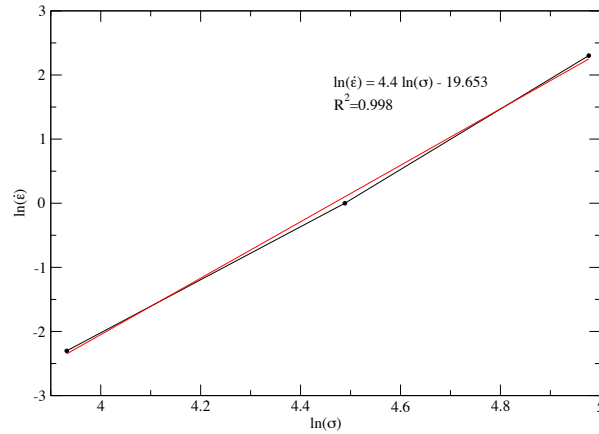
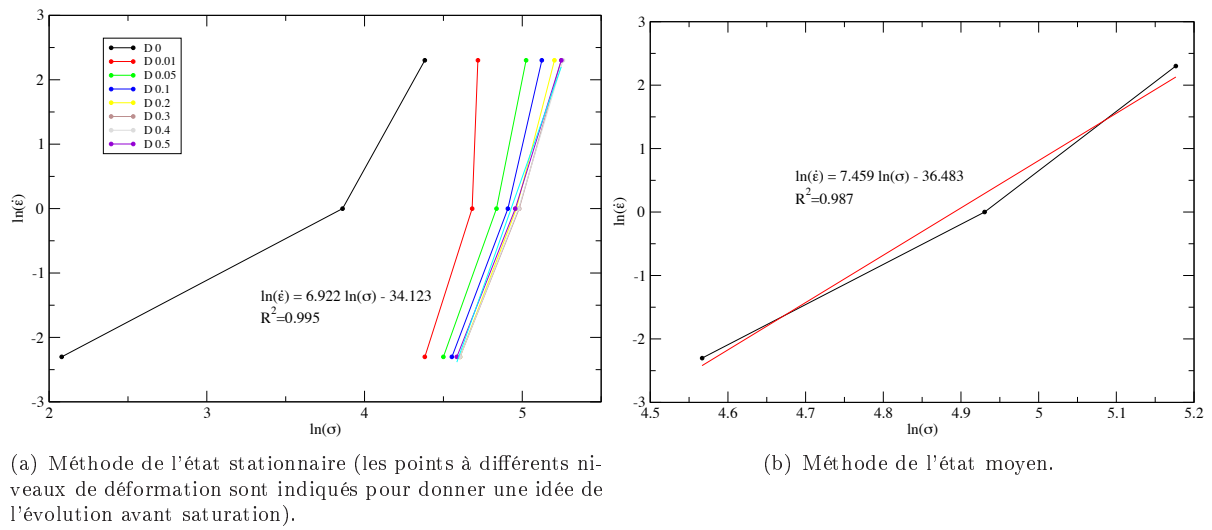


FIG. 5.22: Identification de l'exposant viscoplastique de la ferrite à l'aide d'un tracé log/log.



(a) Méthode de l'état stationnaire (les points à différents niveaux de déformation sont indiqués pour donner une idée de l'évolution avant saturation).

(b) Méthode de l'état moyen.

FIG. 5.23: Identification de l'exposant viscoplastique de l'austénite à partir des données de [27].

5.2.4 Résultats dans le cas biphasé

Nous allons maintenant présenter des résultats sur l'écoulement macroscopique et sur l'évolution morphologique des aciers biphasés. Ces résultats vont venir compléter les observations générales trouvées dans la bibliographie.

5.2.4.a Comportement macroscopique

Le comportement des biphasés nous est donné au travers d'essais sur les matériaux C, D, E, et F. Les courbes relatives aux aciers C, E et F sont obtenues dans les mêmes conditions que celles des phases pures, c'est-à-dire à 1050°C, en vitesse de déformation imposée égale successivement à 0.1, 1 et 10s⁻¹. La figure 5.24 présente les résultats de ces essais pour les différentes vitesses.

En considérant cette figure, nous pouvons remarquer tout d'abord qu'à forte vitesse l'austénite pure semble initialement plus molle que la ferrite pure. Cette observation pouvait déjà être faite en considérant la figure 5.21, ceci nuance légèrement l'assimilation de la ferrite à "la phase molle" et est cohérent avec l'équivalence vitesse-température (§1.3.3) et avec le fait, qu'à plus basse température, l'austénite est plus molle que la ferrite (§1.4.1). Néanmoins, dans les conditions d'essai présentées ici, l'austénite devient rapidement plus dure que la ferrite du fait de son écrouissage prononcé.

Les matériaux biphasés présentent tous des contraintes d'écoulement assez faibles et sensiblement plus

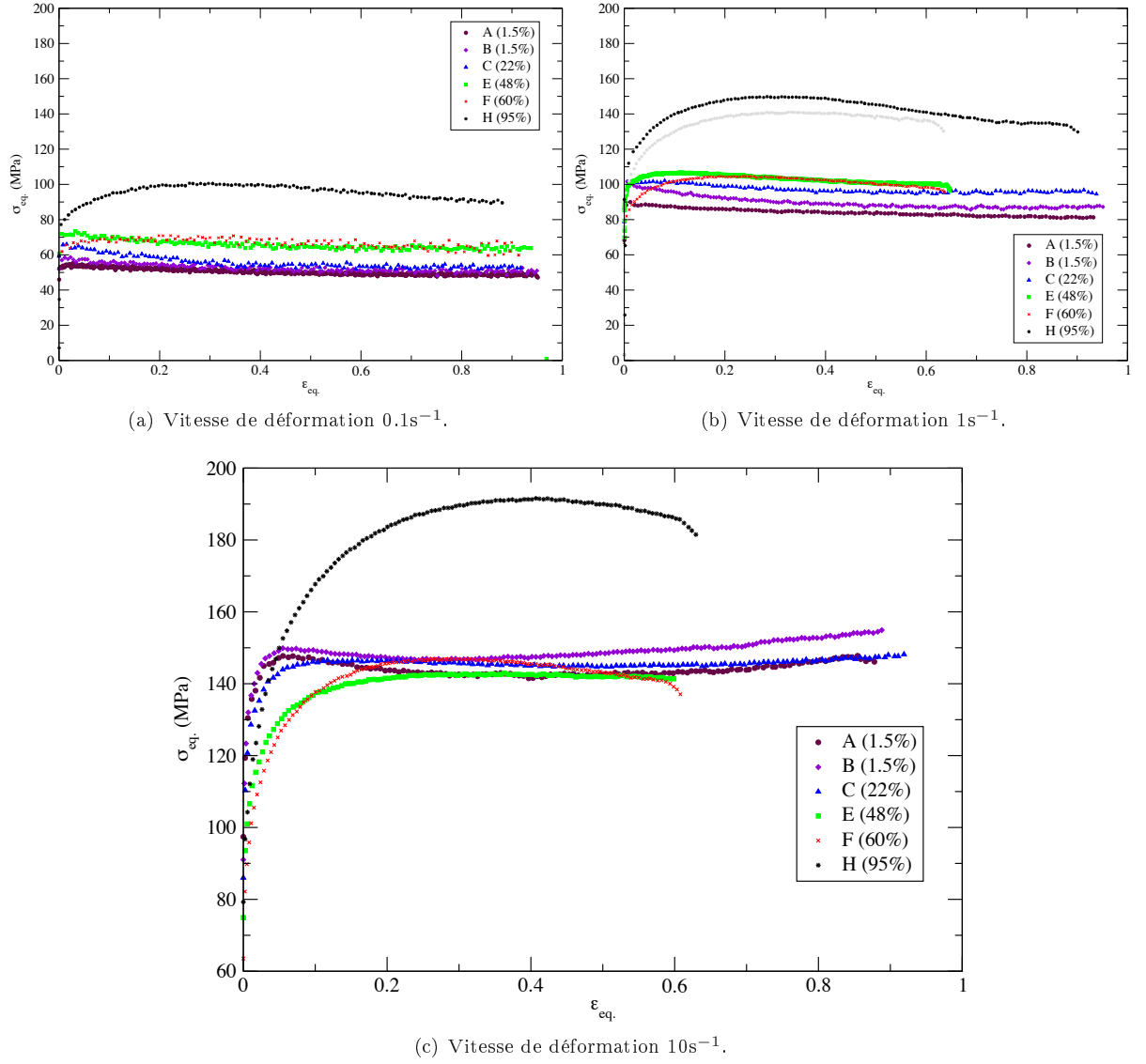


FIG. 5.24: *Ecoulement des matériaux A, B, C, E, F, H à 1050°C, la valeur entre parenthèses rappelle le pourcentage d'austénite.*

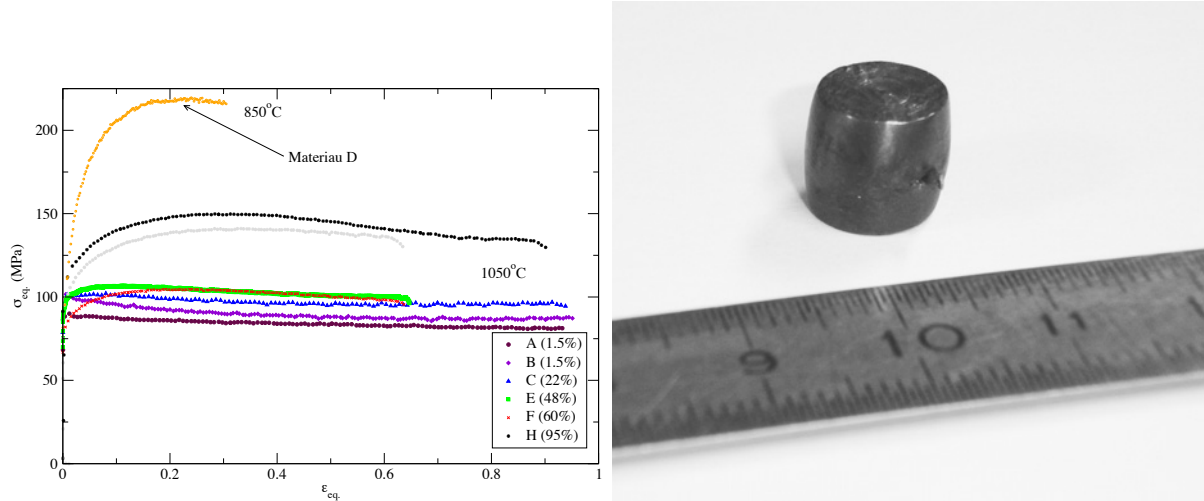
proches de la contrainte d'écoulement de la ferrite que de celle de l'austénite¹². Ce phénomène semble s'accroître avec l'augmentation de la vitesse et n'est pas sans rappeler les observations faites par Vernusse et reportées à la figure 1.18.

De même, les nuances biphasées présentent un écrouissage faible par rapport à celui de la phase pure austénitique, ce qui suggère un écoulement dominé par la phase ferritique. Cependant, pour les vitesses les plus importantes et les concentrations en austénite les plus marquées, on retrouve des courbes présentant des croissances similaires à celles de l'austénite pure. Malgré cet écrouissage "austénitique", il est particulièrement remarquable, à la figure 5.24(c) que le comportement du biphasé sature au niveau de celui de la phase molle, ce qui montre une fois encore l'importance que doit jouer la phase ferritique sur le comportement mécanique des matériaux élaborés par Brown.

Enfin, nous pouvons noter sur cette même figure que les nuances biphasées les plus riches en austénite (E et F) présentent un écoulement plus mou que celui de chacune des phases pures. Cette observation suggère qu'un autre mécanisme de déformation pourrait être activé dans une telle configuration.

¹²Nous n'insisterons pas ici sur l'ordonnement relatif de ces courbes, nous nous contenterons d'observer que celui-ci semble cohérent (la contrainte d'écoulement asymptotique de l'austénite augmente avec la teneur en austénite du matériau) au vu des incertitudes proposées précédemment (environ 6%).

Une caractérisation macroscopique du matériau D a été réalisée, par Hernandez Castillo [74], en compression axisymétrique car cet auteur ne pouvait pas fournir une quantité de matériau (exempt de fissures) suffisante pour usiner une éprouvette de compression plane. Le dépouillement de cet essai a été réalisé conformément aux recommandations du document [171]. La température d'essai étant de 850°C pour une vitesse de déformation imposée de 1s^{-1} . La courbe correspondante est donnée figure 5.25(a). Nous avons ajouté sur ce graphe les résultats précédents à 1050°C pour la même vitesse à titre de comparaison.



(a) Courbe d'écoulement du matériau D et reproduction des résultats de la figure 5.24(b). (b) Echantillon après déformation (on distingue un morceau du thermocouple mesurant la température à cœur).

FIG. 5.25: Caractérisation de l'acier D lors d'un essai de compression axisymétrique à 850°C pour une vitesse de déformation unitaire.

5.2.4.b Evolution de la microstructure

Afin de caractériser l'évolution de la morphologie microstructurale, un essai de compression plane a été réalisé sur un échantillon de matériau G prélevé sur un lopin différent de celui étudié à la section précédente et présentant une fraction de phase très proche de celle annoncée par Boldetti (53% d'austénite). Cet essai est mené à une température de 850°C, à la vitesse de 0.7s^{-1} , et pour un rapport de réduction final de 30% (ou une déformation logarithmique de 0.357). L'aspect de la microstructure avant et après l'essai est représenté figure 5.26(a) et figure 5.26(b). Sur ces images la direction de compression est la verticale alors que la direction transverse (parallèle à la dimension b présentée figure 5.18) est la normale à l'image. La déformation rend les zones inidentifiables car le contraste de phase lié au relief après l'attaque décrite au §5.1.2.a disparaît. Malgré tout, en considérant la position des phases obtenues par EBSD, nous pouvons retrouver les zones étudiées initialement, à condition d'avoir défini des repères pour permettre la superposition de l'image fournie par le détecteur d'électrons secondaires et de celle obtenue par EBSD¹³. C'est cette superposition que présente la figure 5.27. Cette démarche montre que l'EBSD peut permettre, dans un cas biphasé, de se substituer à un contraste de phases lorsque celui-ci disparaît ce qui peut être utile pour retrouver une zone et pour comparer l'évolution locale de la microstructure.

Les textures obtenues après déformation sont très marquées (figure 5.28 et figure 5.29) comme on pouvait s'y attendre et les formes obtenues sont caractéristiques du laminage ou de la compression plane des cristaux cubiques [97]. L'évolution de la fonction d'auto-corrélation normalisée est donnée à la figure 5.30 et présente une évolution cohérente par rapport à la déformation totale appliquée. Dans ce cas, comme dans le cas traité au §5.1.2.b, les isovaleurs peuvent être modélisées par des ellipses jusqu'à la décorrélation. Celles-ci sont alignées avec l'axe horizontal de la microstructure qui est la direction "de laminage" de l'essai. Le rapport initial/final des petits axes des ellipses isovaleurs reste proche de 1.5 et vaut 1.4 ($\approx \frac{1}{0.7}$) en moyenne, de même le rapport des grands axes vaut en moyenne 0.61, ce qui coïncide assez

¹³ En fait, cette information subit un prétraitement de filtrage afin de diminuer le bruit lié aux erreurs d'indexation.

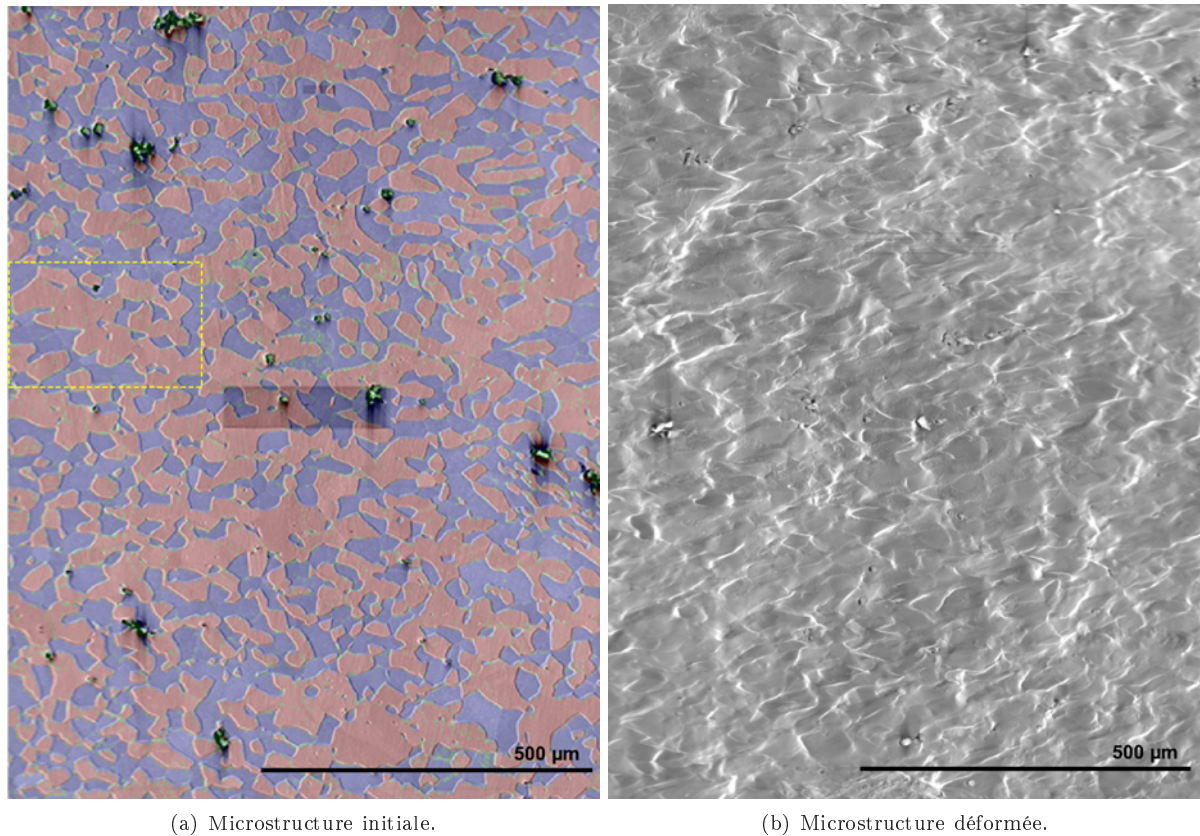


FIG. 5.26: *Microstructure avant et après l'essai de compression plane. La figure (a) présente la superposition de l'image en électrons secondaires et des domaines de phases obtenus par EBSD ainsi qu'une zone repère qui sera retrouvée dans l'image déformée.*

bien avec les rapports de réduction imposés à l'échantillon. Ceci conforte l'hypothèse que la symétrie de répartition des phases évolue comme la transformation macroscopique.

A l'échelle des grains, on peut s'intéresser au rapport de forme (grand axe sur petit axe) et à l'orientation des ellipses de même surface approchant au mieux la forme des grains. On passe de rapports de forme de 1.8 et 1.9 dans l'austénite (les macles ayant été supprimées) et la ferrite, à respectivement des rapports de 2.4 et 2.5. De même les orientations moyennes (pour des angles pris entre 0° et 90°) respectivement de 30° et 37° passent à 21° et 22° . Nous avons donc bien une évolution de forme et d'orientation allant dans le sens d'un aplatissement de la microstructure au cours de la sollicitation. Nous noterons que ces valeurs doivent être considérées uniquement à titre qualitatif du fait du très grand nombre d'erreurs d'indexation.

Les caractérisations précédentes, bien qu'intéressantes pour qualifier le comportement du matériau du point de vue de son comportement global et de l'évolution moyenne de sa microstructure, ne permettent pas de comprendre comment se distribuent les champs mécaniques entre les deux phases. Cette distribution est visiblement complexe d'après les résultats obtenus sur l'écoulement des aciers biphasés. On comprend bien, dans un tel cas, l'aspect inadapté d'une "loi des mélanges". La question que nous nous posons par la suite est de savoir si un modèle d'homogénéisation nous permettrait de reproduire, ou du moins de prévoir, la tendance observée au cours de ces essais. Avant de pouvoir nous intéresser à cette question, il peut être utile de caractériser de façon plus fine la partition des déformations entre les phases au cours de la sollicitation. Cet objectif constitue le fil directeur de la section suivante dédiée aux mesures de champs dans le matériau biphasé.

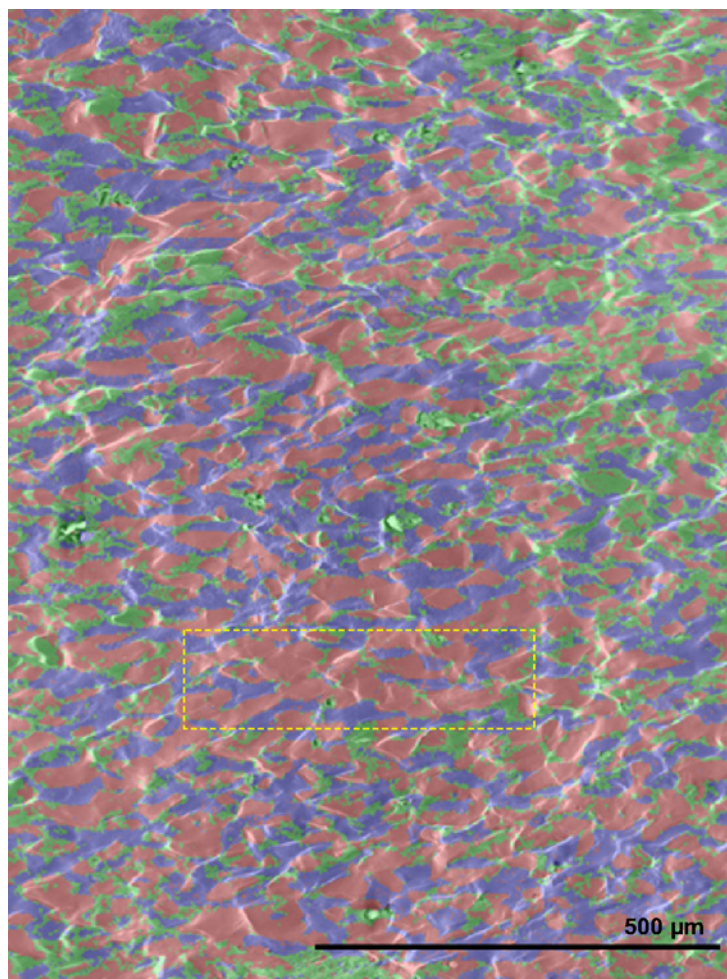


FIG. 5.27: Superposition de 5.26(b) et de la disposition des phases obtenue par EBSD.

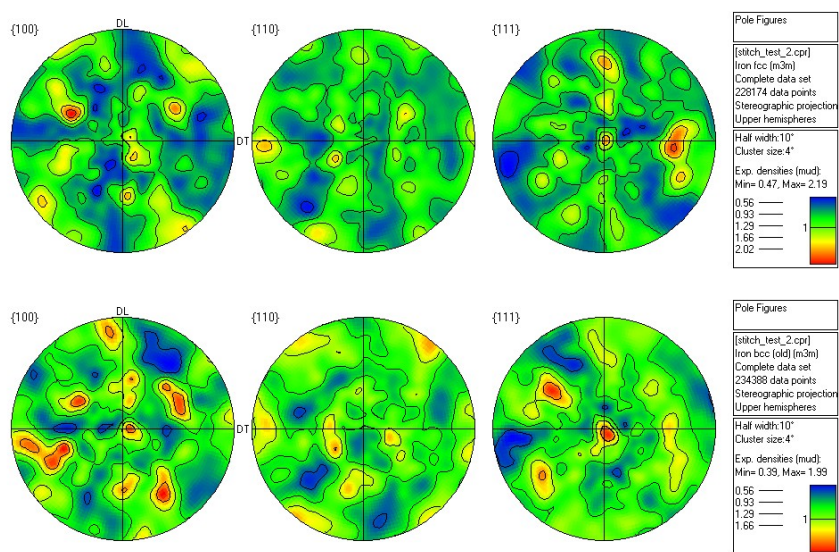


FIG. 5.28: Texture du matériau avant l'essai, austénite en haut et ferrite en bas.

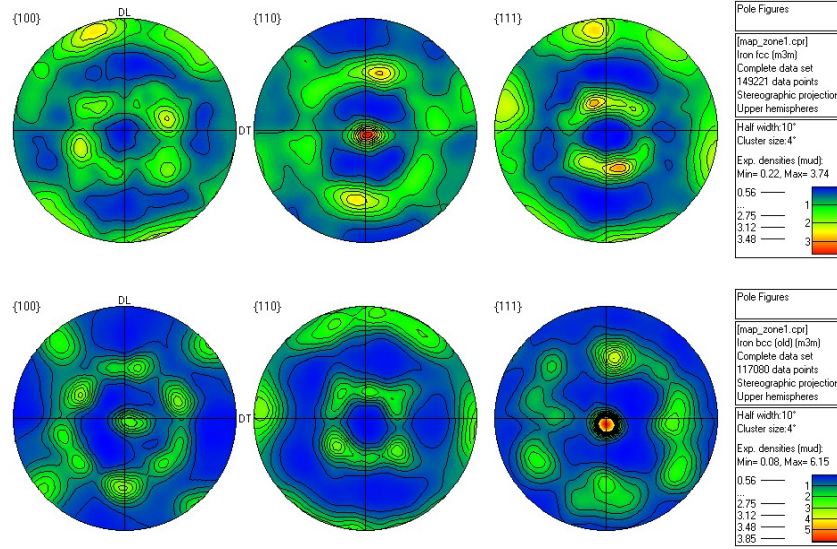


FIG. 5.29: Texture du matériau après l'essai, austénite en haut et ferrite en bas.

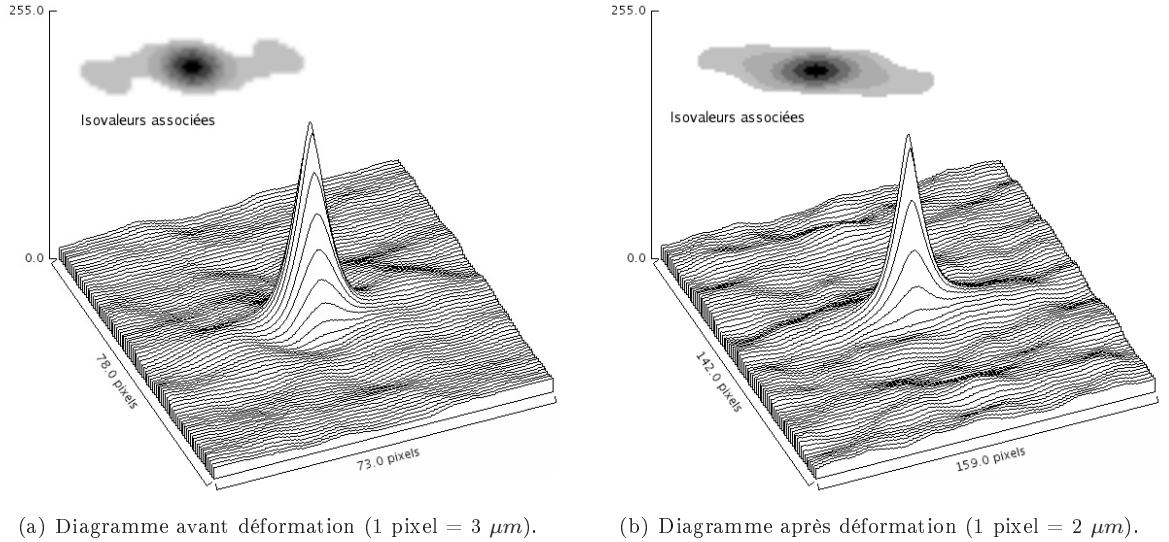


FIG. 5.30: Forme de l'auto-corrélation de la phase austénitique avant et après la déformation.

5.3 Estimation des champs de déformation locaux

L'idée de cette partie est d'obtenir des informations concernant la répartition de la déformation dans le matériau biphasé. Pour ce faire, nous allons utiliser une méthode de mesure des champs de déplacement à l'échelle locale, typiquement à une échelle inférieure à la taille moyenne des grains. Une telle cartographie, associée à un traitement spécifique, nous permet d'estimer le champ de déformation en tout point de la microstructure et ainsi de visualiser la répartition de la déformation. Cette information nous permet également de produire des données qui pourront être comparées aux résultats de nos simulations telles les moyennes et fluctuations des champs par phase.

5.3.1 Principe de la micro-extensométrie

La micro-extensométrie consiste en l'étude des champs de déplacement à l'échelle de la microstructure. Cette caractérisation est réalisée, dans le cas présent, à l'aide d'une méthode optique qui consiste

à identifier des points homologues sur une image avant déformation et sur une image après déformation, comme présenté à la figure 5.31 (a). Dans le cadre de cette étude, nous avons choisi de générer ces points en réalisant le marquage de la microstructure à l'aide d'une grille. Il existe de nombreuses autres méthodes de définition des points homologues qui peuvent être basées sur le contraste naturel du matériau ou sur un marquage artificiel différent tel le mouchetis.

Le choix d'un marquage par grille permet de s'assurer d'une base de mesure donnée, tout en garantissant

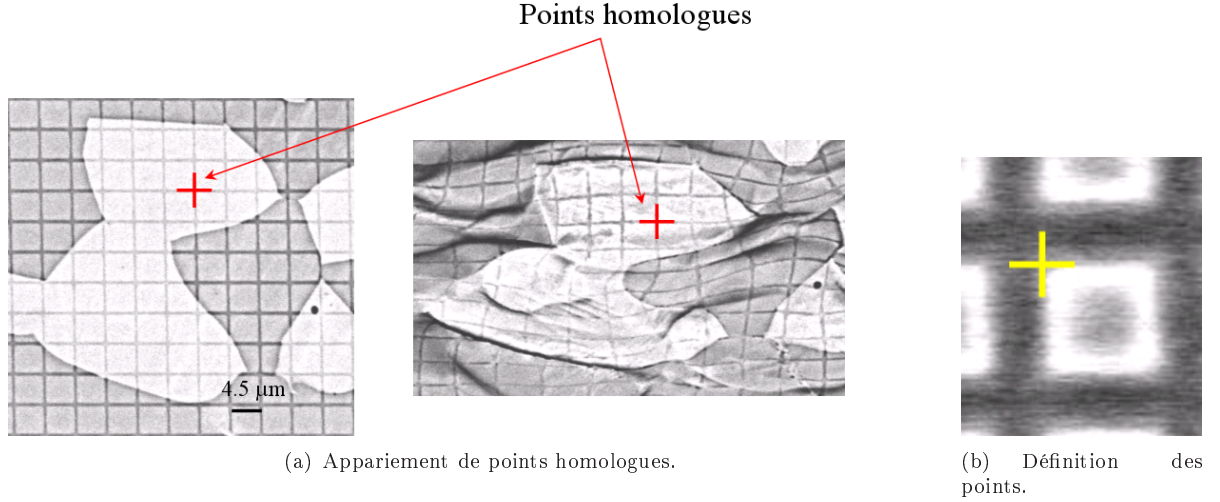


FIG. 5.31: Définition et appariement de points homologues basés sur une microgrille.

a priori une bonne définition des points homologues¹⁴. Dans le cas présent ces points sont définis comme présenté figure 5.31 (b). On verra que l'utilisation d'une grille a d'autres avantages, notamment, lors de l'apparition de discontinuités de déplacements.

L'appariement des points est réalisé de façon semi-automatique à partir d'une technique de corrélation d'image basée sur la définition d'un coefficient de corrélation (scalaire quantifiant la similarité de deux éléments d'image), d'un domaine de corrélation (forme et taille des éléments d'image en question), d'une distance de recherche par rapport à la position supposée du domaine de corrélation après déformation et d'une description de la transformation locale liant les deux éléments d'image (translation ou transformation homogène). La connaissance du rapport de réduction de l'essai fournit une approximation de la forme et de la position des domaines de corrélation et de recherche finaux. Le schéma 5.32 explicite un peu plus la démarche utilisée. En pratique, cette corrélation est réalisée à l'aide d'une implémentation logicielle de la méthode brièvement présentée. Cet outil, élaboré par Bornert et Doumalin et désigné sous le nom de CORRELMANUV, permet de réaliser la corrélation des points les uns après les autres. Il permet également une intervention de l'utilisateur dans les cas où la corrélation s'avère insuffisante pour un appariement automatique, comme le montre la figure 5.33.

Une fois l'association points initiaux/points finaux réalisée, on dispose de la projection plane du champ de déplacement à un mouvement de corps rigide et aux défauts d'images près, que l'on peut négliger pour les niveaux de déformation atteints. Afin d'obtenir les composantes planes du champ gradient de la transformation, il nous faut réaliser une dérivation en espace. Celle-ci est obtenue [20] en utilisant une formule de Green (5.10), où \underline{x} et \underline{X} représentent, respectivement, la position dans la configuration actuelle (image de l'état déformé) et dans la configuration de référence (image de l'état non déformé).

$$\underline{\underline{F}}^p = \frac{1}{|\Omega^p|} \int_{\Omega^p} \frac{\partial \underline{x}}{\partial \underline{X}} dV_{\underline{X}} = \frac{1}{|\Omega^p|} \int_{\partial\Omega^p} \underline{x} \otimes \underline{n} dS_{\underline{X}} \quad (5.10)$$

En effet, on considère que le gradient de la transformation locale, en un point p donné de la microstructure est une quantité moyennée à l'échelle d'un domaine volumique Ω^p limité par quelques points entourant celui-ci. La surface fermée $\partial\Omega^p$ peut être définie comme celle du cylindre ayant pour base un polygone

¹⁴En cas de problème lors de l'appariement des points par corrélation, l'utilisateur peut assez facilement retrouver un point d'intersection de grille.

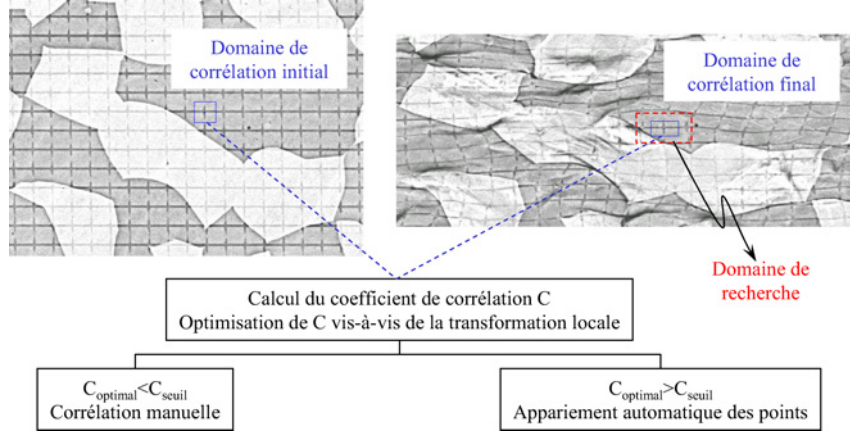


FIG. 5.32: Principe de la méthode d'appariement par corrélation.

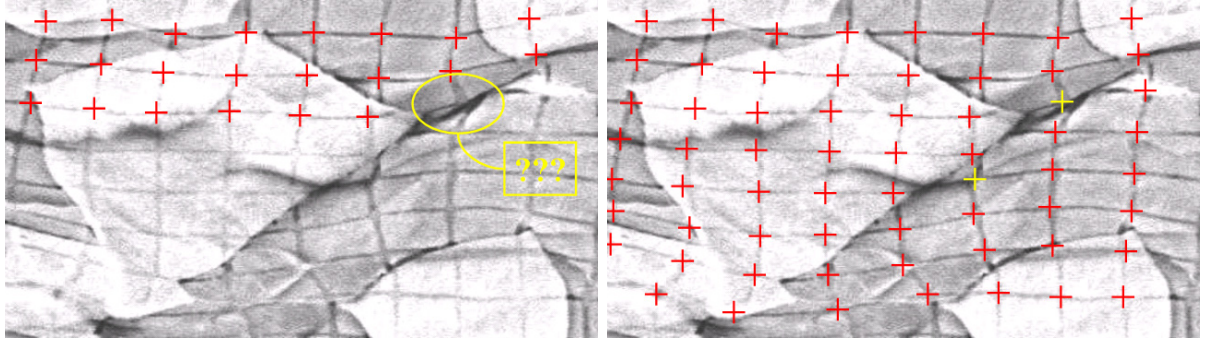


FIG. 5.33: Les points représentés en rouge sont ceux qui présentent un coefficient de corrélation suffisant pour valider l'appariement proposé par le logiciel. Les points en jaune au contraire nécessitent l'intervention de l'utilisateur pour réaliser la sélection.

formé par N voisins du point p et de génératrice normale à l'image et de norme e . Le gradient de la transformation est alors constitué de trois termes : un terme lié à la contribution de la surface latérale S_{lat} du cylindre et deux termes liés aux contributions de la surface polygonale visible S_{base} et d'une surface identique S_{base}^- mais définie à une profondeur e dans le matériau. On notera ∂S_{base} le contour unidimensionnel associé à la surface de base.

$$\underline{\underline{F}}^p = \frac{1}{|S_{\text{base}}|} \left[\left(\int_{\partial S_{\text{base}}} \frac{\underline{x} dL_{\underline{X}}}{e} \otimes \underline{n} dL_{\underline{X}} \right) + \frac{1}{e} \int_{S_{\text{base}}} \underline{x} dS_{\underline{X}} \otimes \underline{e}_3 - \frac{1}{e} \int_{S_{\text{base}}^-} \underline{x} dS_{\underline{X}} \otimes \underline{e}_3 \right] \quad (5.11)$$

où \underline{e}_3 désigne le vecteur unitaire dans la direction normale au plan d'observation et \underline{n} la normale unitaire sortante au contour. En faisant tendre l'épaisseur e vers 0, on obtient l'expression du tenseur gradient de la transformation complet.

$$\underline{\underline{F}}^p = \frac{1}{|S_{\text{base}}|} \left[\int_{\partial S_{\text{base}}} \underline{x} \otimes \underline{n} dL_{\underline{X}} + \frac{\partial \int_{S_{\text{base}}} \underline{x} dS_{\underline{X}}}{\partial X_3} \otimes \underline{e}_3 \right] \quad (5.12)$$

Il est clair que les composantes hors plan de ce tenseur ne peuvent être obtenues directement par la mesure. En effet, les composantes hors plan de \underline{x} sont inconnues, tout comme le second terme relatif au gradient de la transformation dans la profondeur de l'échantillon. Ainsi, seuls quatre termes du tenseur sont connus à partir des observations de surface. Ils sont donnés par les expressions (5.13) en considérant

une interpolation linéaire du déplacement entre les points du contour.

$$F_{11} = \frac{1}{2|S_{\text{base}}|} \sum_{i=1}^N x_1^i (X_2^{i+1} - X_2^{i-1}) \quad (5.13a)$$

$$F_{12} = \frac{1}{2|S_{\text{base}}|} \sum_{i=1}^N -x_1^i (X_1^{i+1} - X_1^{i-1}) \quad (5.13b)$$

$$F_{21} = \frac{1}{2|S_{\text{base}}|} \sum_{i=1}^N x_2^i (X_2^{i+1} - X_2^{i-1}) \quad (5.13c)$$

$$F_{22} = \frac{1}{2|S_{\text{base}}|} \sum_{i=1}^N -x_2^i (X_1^{i+1} - X_1^{i-1}) \quad (5.13d)$$

Les N points entourant p sont numérotés dans le sens trigonométrique et l'on considère que la numérotation est "cyclique" ($X_k^0 = X_k^N$ et $x_k^{N+1} = x_k^1$). La mesure de la surface $|S_{\text{base}}|$ peut être obtenue à l'aide de la norme du produit vectoriel :

$$2|S_{\text{base}}| = \left\| \sum_{i=1}^N \underline{X}^i \times \underline{X}^{i+1} \right\| = \sum_{i=1}^N \det(\underline{X}^i, \underline{X}^{i+1}) \quad (5.14)$$

Des détails supplémentaires relatifs à ce type de traitement peuvent être trouvés dans [20] ou encore [48]. Nous nous contenterons de préciser que dans cette étude le schéma d'intégration choisi est celui présenté à la figure 5.34(a) pour la caractérisation des champs locaux. Un traitement similaire est possible pour estimer la moyenne du gradient de la transformation sur des domaines spécifiques, tels des domaines de phase, en choisissant des contours (figure 5.34(b)) approchant les domaines de phase, en intégrant ou non la frontière interphase. Dans la suite les grandeurs moyennes déduites de contours intégrant l'interface seront notées d'un '+' et celles obtenues à partir d'un calcul "sans interface" seront désignées par un '-'. Une fois le gradient de la transformation estimé, on peut obtenir la déformation en faisant le choix

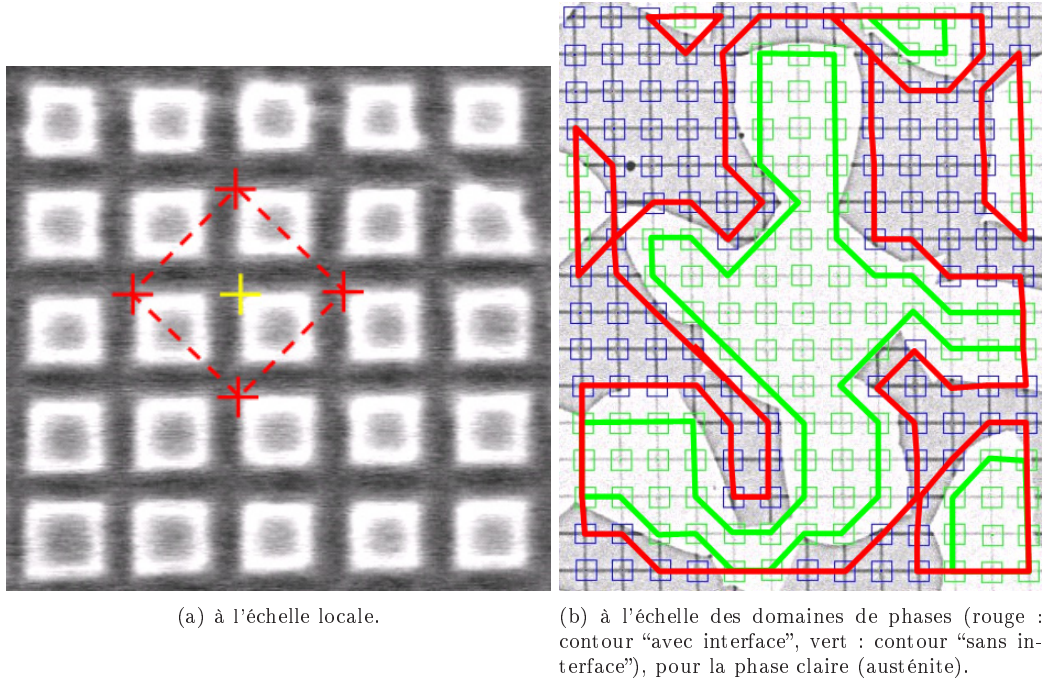


FIG. 5.34: Schémas d'intégration caractérisant le gradient de la transformation locale et le gradient moyen par phase.

d'une mesure (déformation au sens de Green-Lagrange, logarithmique ou linéarisée) et d'une hypothèse

permettant de fixer la valeur des termes inconnus de \underline{F} et nécessaires au calcul de ces déformations. On considère, classiquement, que la direction normale à l'image, notée 3, est une direction principale pour la transformation et qu'il n'y a pas de rotation hors plan, ainsi seul le terme F_{33} est non nul alors que $F_{i3} = F_{3i} = 0$ pour $i \in \llbracket 1; 2 \rrbracket$. Plusieurs hypothèses pour la détermination de cette valeur principale sont alors possibles, l'hypothèse d'incompressibilité consiste à imposer au déterminant de \underline{F} d'être unitaire. F_{33} est alors égale à l'inverse du produit des deux autres valeurs principales. On peut également imaginer que la déformation est plane dans le plan de l'image ce qui conduit à poser $F_{33} = 1$. Ces hypothèses nous fournissent \underline{F} dans son intégralité, ce qui permet de calculer la déformation dans la mesure de son choix. Nous ferons l'hypothèse d'incompressibilité et vérifierons que F_{33} est effectivement proche de 1, comme attendu dans le cas d'un essai parfaitement plan.

Remarque : Incertitudes liées au calcul du gradient

Les mesures de déformation obtenues à l'aide de ces méthodes présentent une certaine incertitude. Sans rentrer dans les détails liés aux calculs de ces incertitudes, nous allons néanmoins en expliciter quelques sources. Nous distinguerons incertitudes relatives liées à la comparaison de valeurs mesurées les unes par rapport aux autres (comparaison d'une composante de déformation en deux points du champ par exemple) et incertitudes absolues liées à la précision d'une mesure par rapport à la réalité expérimentale. Les sources d'incertitudes absolues sont principalement liées à la technique d'imagerie utilisée. Par exemple dans le cas présent, le positionnement d'un objet dans le microscope électronique est difficile à reproduire parfaitement. La distance de travail peut donc varier si l'on réalise deux fois l'acquisition des images, le microscope corrige cette différence d'altitude pour nous fournir le grandissement désiré mais cette correction est souvent imparfaite et source d'erreur. Cette erreur a été quantifiée par Doumalin [48] sur un microscope conventionnel et est reproduite en figure 5.35. Nous pourrions estimer dans ce travail que les erreurs de mesures absolues sont de l'ordre du pourcent.

Les comparaisons de mesures en différents points de la surface ne présentent plus cette incertitude liée

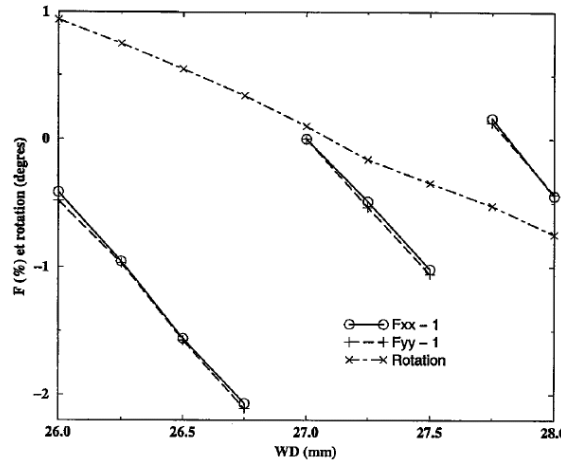


FIG. 5.35: Exemple d'une source d'erreur liée à la technique d'imagerie utilisée, d'après [48]. Erreur sur les composantes du gradient des déplacements en fonction de la distance de travail.

au positionnement. Malgré tout l'obtention des images peut encore être une source d'erreur du fait, par exemple, des aberrations du microscope apparaissant à faible grandissement. Néanmoins si l'on considère un grandissement suffisant la source d'incertitude relative qui prédomine est plutôt liée à la méthode de mesure des champs en eux-mêmes.

En effet dans le cas de la mesure locale du champ de déplacement l'incertitude dominante concerne l'appariement des points que l'on peut considérer défini au pixel près. Le logiciel de corrélation nous donne une valeur de l'ordre de grandeur d'une telle erreur, ces mesures se basent sur les calculs d'incertitudes présentés dans [20]. Nous noterons que, dans notre configuration, l'ordre de grandeur de ces erreurs est de quelques fractions de pourcent et dépend du schéma d'intégration et de la base de mesure utilisée (nombre de pixels entre deux barreaux de grille).

En ce qui concerne l'estimation des déformations moyennes par phase cette source de fluctuation est de

l'ordre du centième de pourcent et elle peut être négligée devant l'incertitude liée à la description des domaines de phase. L'importance de cette erreur est illustrée à la figure 5.34(b) où l'on remarque que l'interphase est comprise entre les deux discrétisations, avec et sans interface, utilisées classiquement pour estimer la déformation moyenne des deux phases. Nous reviendrons dans la suite de ce travail sur cette dernière incertitude.

5.3.2 Méthode expérimentale

La démarche expérimentale est composée de deux étapes. Il s'agit d'une part de réaliser une microgrille à la surface d'un élément de matière et ensuite de soumettre cet élément à un essai de compression plane à haute température. Il est de plus nécessaire de faire apparaître le contraste interphase sur notre échantillon, afin de distinguer la déformation de la phase ferritique de celle de la phase austénitique, sans avoir à recourir à des analyses EBSD telles celles menées à la section 5.2.4.b.

Nous allons décrire dans un premier temps la méthode choisie pour solliciter un élément de matière sur lequel a été déposée une microgrille, avant de revenir sur la réalisation de celle-ci. Ces étapes sont également décrites en détail dans les thèses de Hernandez Castillo [73] et de Boldetti [18].

5.3.2.a Montage

Nous souhaitons avoir accès au comportement à cœur du matériau soumis à la compression plane. Cette volonté nous conduit donc à réaliser une cavité dans l'échantillon à l'intérieur de laquelle un insert va être placé. A la surface de cet insert des microgrilles sont déposées. Ce protocole (représenté figure 5.36) présente l'avantage de protéger la surface d'étude des phénomènes d'oxydation importants à haute température et qui dégraderaient inmanquablement la surface et donc la microgrille. Dès lors que

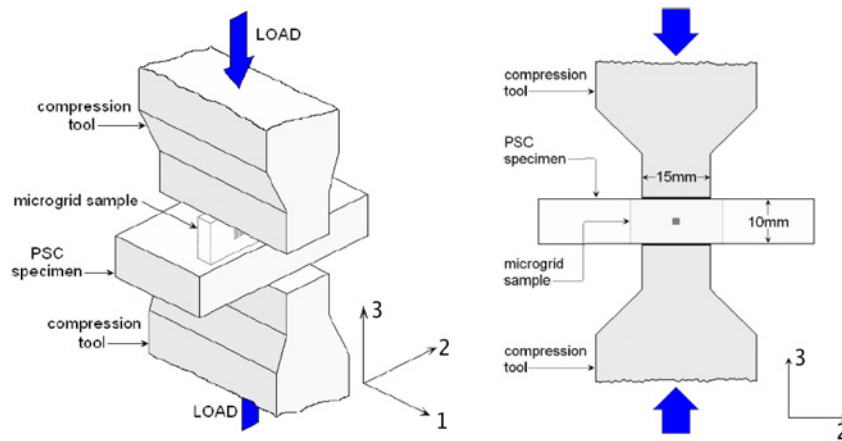


FIG. 5.36: Schéma de l'essai en présence d'un insert d'après [73].

l'élément de matière étudié est placé dans le matériau, il faut s'assurer de la cohésion de l'insert avec le reste de l'échantillon et de la minimisation des phénomènes de frottement qui pourraient endommager la surface d'étude. La cohésion est assurée en frettant à chaud l'insert dans l'échantillon et en soudant superficiellement ces deux éléments comme présenté à la figure 5.37(a). Afin de minimiser la détérioration de la grille du fait des frottements dès la mise en place de l'insert, il est également nécessaire que la zone en regard de la surface d'intérêt présente un bon aspect de surface.

Pour réaliser cette condition, deux protocoles correspondant à deux géométries d'inserts ont été utilisés respectivement par Hernandez Castillo et Boldetti. La première configuration prévoit un insert en deux parties ; sur chacune de ces parties une surface est polie en utilisant des abrasifs de granulométrie inférieure au micron. Sur l'une des surfaces une microgrille est alors déposée et l'ensemble est ensuite accolé avant d'être inséré dans l'échantillon (figure 5.37(a)). Boldetti, quant à lui, a utilisé un insert en un seul morceau (figure 5.37(b)) associé à un polissage de l'intérieur de la cavité à l'aide d'une petite fraise de modélisme. L'intérêt de cette méthode est que l'introduction d'un insert en un seul morceau est plus facile. A contrario, ce protocole permet difficilement de s'assurer de l'état de la surface en vis-à-vis de la grille. Au final, ces

deux techniques donnent des résultats comparables. La cohésion de la grille avec le reste du matériau est bonne. En effet, quel que soit le type d'insert utilisé, on note, après la sollicitation, que la face en regard présente l'image en négatif de la microgrille.

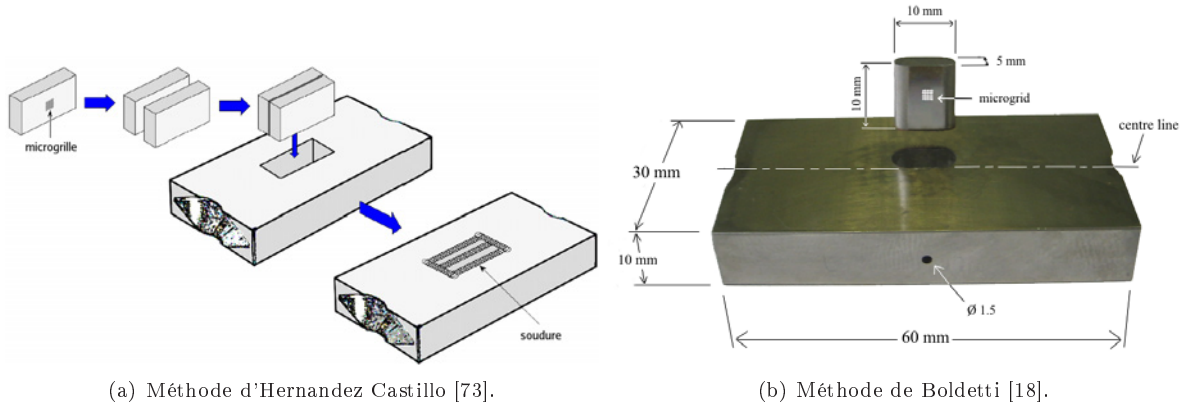


FIG. 5.37: Différentes géométries d'inserts envisagées.

5.3.2.b Préparation de surface

Comme nous l'avons souligné, il serait souhaitable de faire apparaître un contraste interphase. Celui-ci nous permettrait, en effet, d'associer à chaque point de corrélation une phase cristallographique, ce qui est nécessaire afin de pouvoir définir les contours introduits à la figure 5.34(b). Un tel contraste peut être obtenu après polissage mécanique, à l'aide d'un polissage électrolytique à température ambiante, en utilisant une solution à 20% de soude (NaOH) sous une tension de 2V pendant quelques secondes. Cette préparation permet d'obtenir une coloration sombre de la ferrite, tout en évitant de donner un relief trop important à la surface en creusant l'une ou l'autre des phases. Par contre, cette attaque ne permet pas, a priori, de s'affranchir de la surface perturbée mécaniquement lors du polissage et il faudrait donc l'associer à une autre attaque pour permettre, par exemple, une analyse par EBSD. Une fois un tel contraste obtenu, nous allons chercher à réaliser une grille à la surface de l'échantillon.

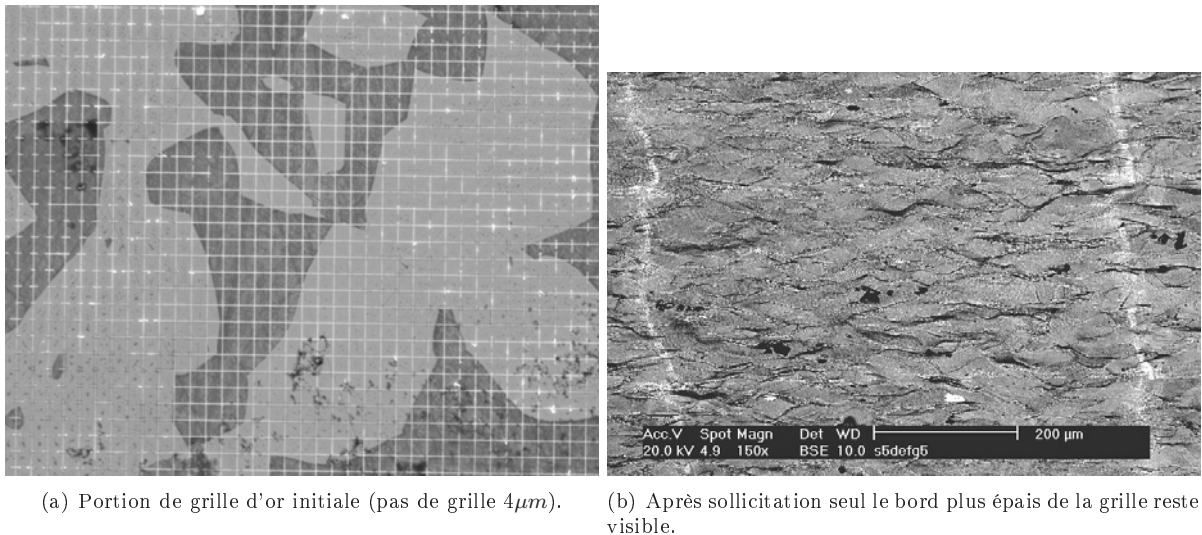


FIG. 5.38: Problèmes de tenue rencontrés dans le cas de grilles d'or.

Nous utilisons ici le principe d'un procédé électrolithographique proposé initialement par [8]. Il s'agit, tout

d'abord, de recouvrir la surface à traiter d'une fine couche de résine électro-sensible¹⁵. Le dépôt de cette couche est réalisé sur le matériau en rotation afin d'assurer l'homogénéité de son épaisseur (typiquement quelques dixièmes de microns) sur la zone d'intérêt. Il s'agit ensuite d'activer la polymérisation de ce revêtement à l'aide d'une cuisson de trente minutes à 140°C. L'échantillon est alors placé dans le microscope électronique à balayage et positionné au niveau de la zone considérée, afin de réaliser son irradiation par le faisceau d'électrons. Ce positionnement doit, bien entendu, être réalisé "à l'aveugle", c'est-à-dire sans émission d'électrons afin de ne pas irradier la surface au cours du déplacement. La réalisation d'une grille nécessite de disposer d'un système de pilotage du faisceau¹⁶. La taille de faisceau et la vitesse de balayage doivent permettre de fournir une quantité d'électrons suffisante pour rompre les chaînes de polymères sur toute l'épaisseur de résine. La taille des lignes "impressionnées" dépend essentiellement de ces deux paramètres et de la nature du matériau. En effet sa capacité à "rétro-diffuser" les électrons influera sur l'irradiation du polymère. A l'aide de microscopes électroniques conventionnels, on peut raisonnablement réaliser des grilles dont le pas est de l'ordre du micron et dont l'épaisseur de ligne est de quelques dixièmes de microns.

La zone irradiée est ensuite dissoute en trempant, pendant environ une minute trente, l'échantillon dans une solution composée de 75% de propanol-2 (C_3H_8O) et de 25% de méthyléthylcétone (C_4H_8O). A cette étape, c'est en quelque sorte un pochoir de résine qui recouvre le matériau.

On peut alors choisir, par exemple, de réaliser un dépôt d'or par pulvérisation cathodique avant de dissoudre le reste de la résine non irradiée à l'aide d'une solution d'acétate d'éthyle ($C_4H_8O_2$). Nos essais devant être menés à haute température ce dépôt d'or est à proscrire. En effet, dans le cadre de cette thèse des essais ont montré qu'à 850°C l'or n'avait pas une tenue suffisante pour que l'on puisse retrouver les grilles après sollicitation (figure 5.38). On utilisera donc plutôt une attaque chimique afin de creuser le matériau et d'obtenir ainsi une grille gravée qui restera visible à l'issue de l'essai. Les schémas de la figure 5.39 résument le processus d'élaboration de ces grilles gravées.

La réalisation de ces grilles est délicate et ce pour plusieurs raisons. La première est liée à l'irradiation

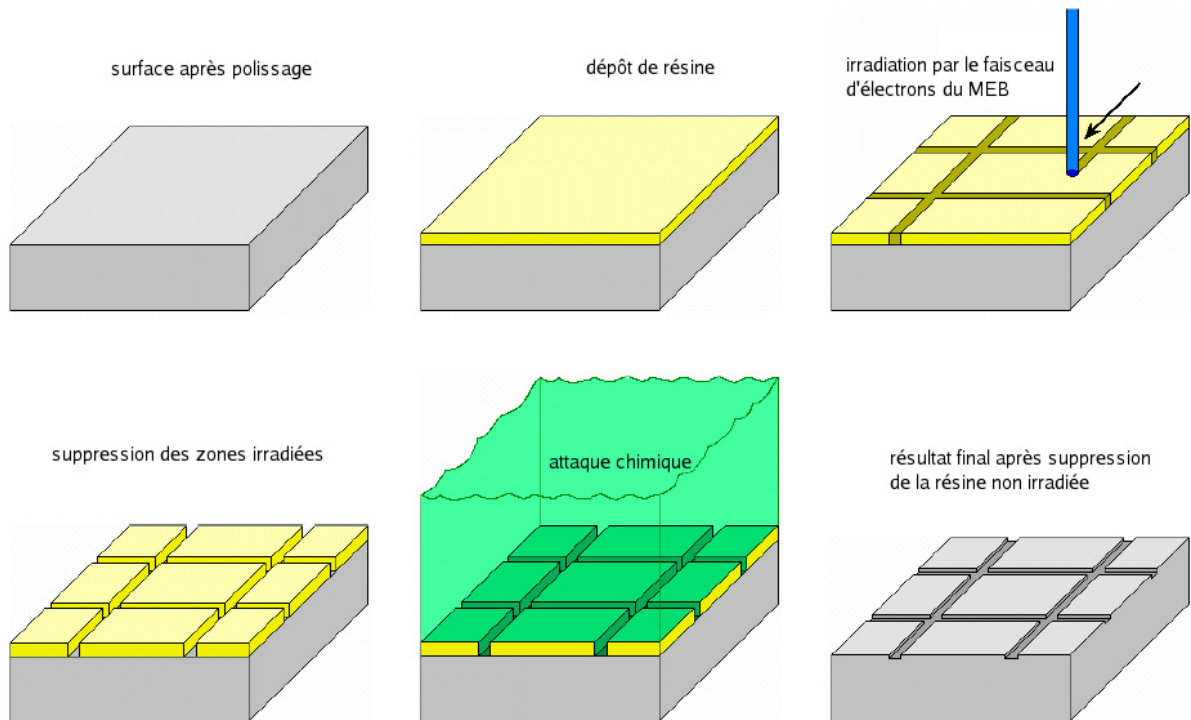


FIG. 5.39: Résumé de la méthode d'obtention de grilles gravées, d'après [75].

¹⁵2.5g de PMMA de masse moléculaire 950K (poudre) dilué dans une solution (de 100cm³) de 2-ethoxyethyl acetate ($C_6H_{12}O_3$).

¹⁶Si l'on souhaite réaliser des lignes continues, il est clair qu'un pilotage analogique est préférable à un pilotage numérique.

de la résine : une irradiation insuffisante conduira à des barreaux de grilles incomplets alors qu'une irradiation prolongée engendrera des barreaux très épais comme le montre la figure 5.40. Il est à noter qu'à faible grandissement des défauts peuvent être observés sur les grilles du fait d'aberrations de la colonne du microscope ou de problèmes de légères défocalisations en périphérie de l'image. Ces difficultés limitent le grandissement employé pour réaliser des grilles et limitent donc également leur taille.

L'attaque qui vise à graver la surface est également une étape critique car une gravure trop profonde

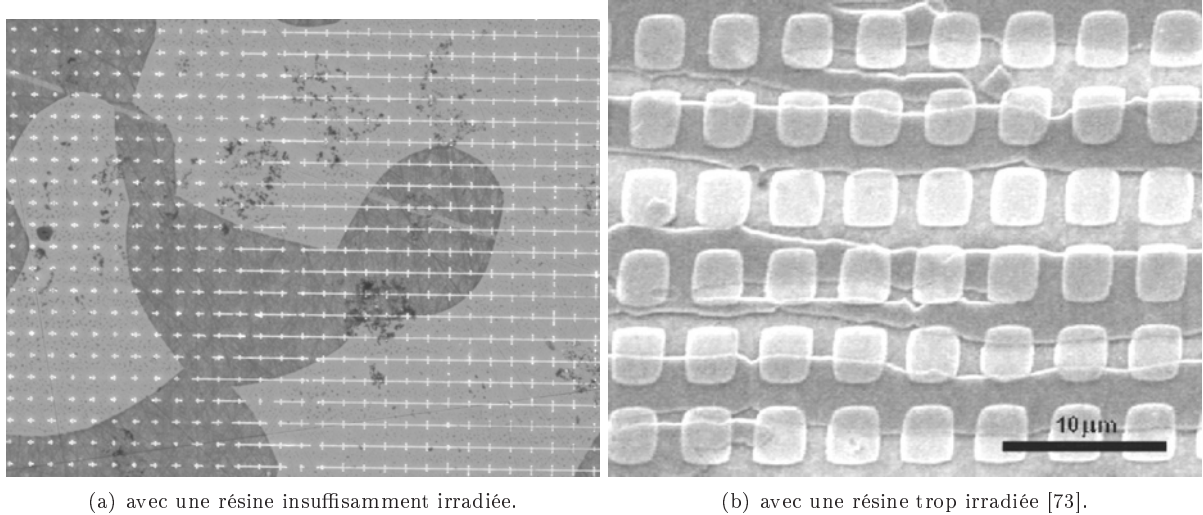


FIG. 5.40: Défauts liés à l'irradiation de la résine.

peut faire disparaître un contraste bien défini initialement, comme le montre la figure 5.41(a). De plus, dans le cas d'un matériau biphasé, l'attaque chimique n'a pas le même effet sur les deux phases, ainsi sur la figure 5.41(b) la grille peut être acceptable dans la phase austénitique mais ne l'est pas dans la phase ferritique. D'autres difficultés apparaissent après la sollicitation, lorsque l'une des phases est plus

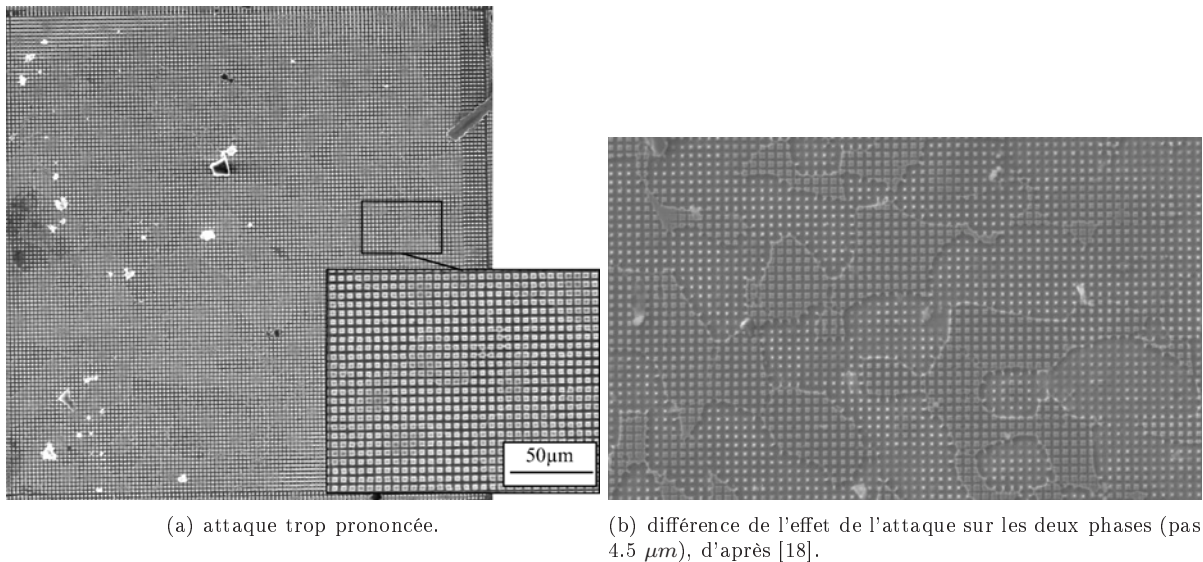


FIG. 5.41: Défauts liés à l'attaque chimique.

creusée que l'autre. C'est le cas, par exemple, lorsque le traitement visant à faire apparaître la coloration interphase est trop long. On peut alors assister, après l'essai mécanique, à une disparition de la micro-grille sur la phase la moins creusée comme le montre la figure 5.42. Il est clair que, dans cette situation,

l'appariement automatique dans la phase où la grille est fortement estompée est quasiment impossible. L'ensemble de ces difficultés explique le peu de résultats obtenus à l'aide de ces méthodes dans le cadre

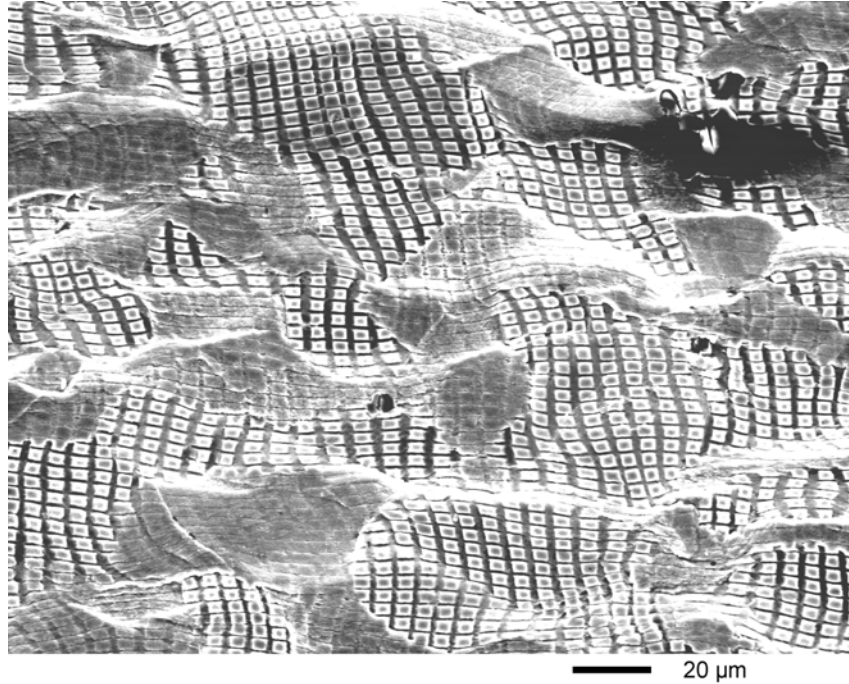


FIG. 5.42: La grille s'estompe dans la phase austénitique car celle-ci est plus "haute" que la phase ferritique, d'après [18].

des thèses traitant de la déformation des aciers inoxydables austéno-ferritiques. Nous considérerons dans la suite de cette section deux situations où de bons résultats ont été obtenus. Malgré nos efforts, il n'a jamais été possible de réaliser, sur un même échantillon, une caractérisation EBSD et une mesure de déformation locale, ce qui aurait été idéal afin de comparer les résultats issus de nos simulations avec l'évolution microstructurale du matériau. Nous considérerons donc des résultats issus de différentes situations expérimentales proches pour caractériser les résultats de nos modèles.

5.3.3 Mesures pour deux microstructures

La démarche présentée va maintenant être appliquée sur deux matériaux différents notés précédemment D et I. Les microstructures initiales associées à ces deux matériaux sont présentées respectivement sur les figures 5.43 et 5.44. Ces deux microstructures sont assez différentes. La première est très équiaxe, alors que la seconde présente une phase austénitique (claire) très allongée. La caractérisation des champs de déformation pour ces deux microstructures devrait donc nous permettre de caractériser l'influence de la distribution des phases.

Il est à noter que la grille du matériau I est réalisée en utilisant deux attaques chimiques [149], chacune censée attaquer préférentiellement une phase, afin d'éviter que l'un des constituants soit plus creusé que l'autre. Cette procédure semble donner de bons résultats. Elle est constituée de deux polissages électrolytiques : l'un réalisé avec une solution d'acide nitrique (HNO_3) et l'autre avec une solution de nital (acide nitrique et éthanol ($\text{C}_2\text{H}_6\text{O}$)).

L'échantillon de matériau modèle D présenté à la figure 5.43 est sollicité en compression plane suivant la verticale de la figure 5.43, à la température de 850°C et à une vitesse de déformation de 1s^{-1} jusqu'à une déformation logarithmique de 30% dans la direction de compression. L'échantillon ainsi déformé est présenté figure 5.45. Le matériau I est, quant à lui, sollicité à la même vitesse mais suivant l'axe horizontal de la figure 5.44, pour une température de 1050°C et une déformation logarithmique totale de 15%. La microstructure du matériau I après déformation est visible figure 5.46¹⁷. Ces deux échantillons présentent

¹⁷Nous noterons la présence de zones endommagées sur cette dernière micrographie, cette détérioration est certainement due aux frottements de l'insert avec la face en regard. Ces zones ne seront pas incluses lors du calcul des déformations.

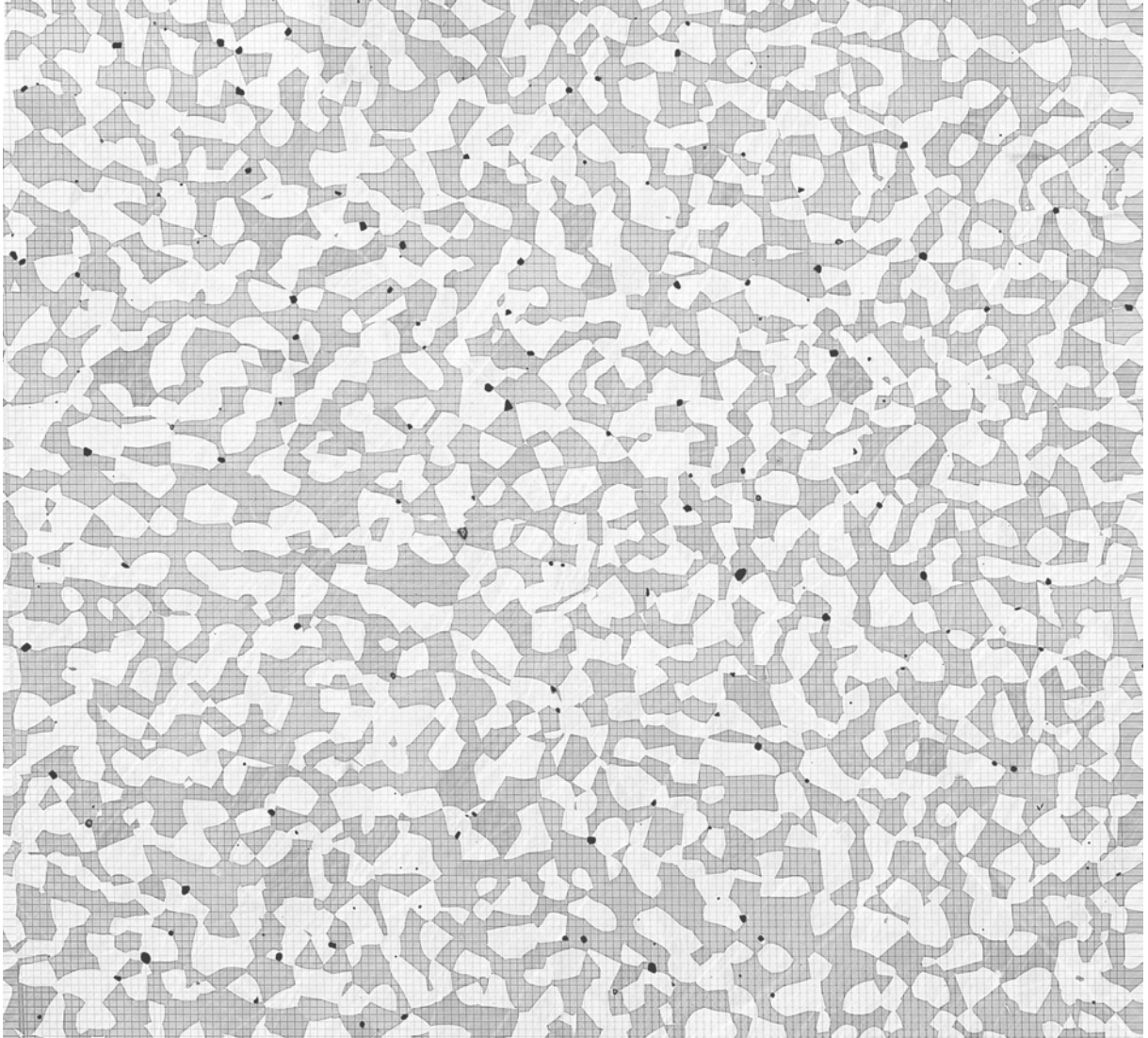


FIG. 5.43: Microstructure du matériau D (la ferrite est la phase sombre) avant essai (pixels carrés de $0.08\mu\text{m}$ de côté, pas de grille de $4.5\mu\text{m}$, taille de l'image 8437×7687 pixels carrés), d'après [73].

respectivement des fractions d'austénite de 52 et 56%. Afin de caractériser la déformation apparaissant au cours de ces essais, nous allons représenter le champ de déformation logarithmique équivalent, au sens de von Mises, pour ces deux microstructures (figures 5.47(a) et 5.47(b)). Ce calcul est réalisé en considérant le matériau incompressible et donc en imposant sur \underline{E} la condition décrite précédemment. Ces cartes sont représentées sur la configuration initiale.

Nous pouvons observer, sur ces deux champs de déformation, l'apparition de bandes de localisations plus marquées dans le cas du matériau D que dans celui du matériau I. Ces bandes orientées de près de 45° par rapport à la direction de sollicitation apparaissent préférentiellement dans la phase molle, mais semblent pouvoir traverser des domaines de phase austénitique si ceux-ci se trouvent dans leur prolongement. Nous pouvons imaginer que la déformation de 15% imposée au matériau I est peut-être insuffisante pour voir se développer la localisation. Mais, en remarquant que les bandes visibles sur cette microstructure apparaissent préférentiellement aux interphases, on voit bien l'importance que la microstructure peut jouer sur le développement de ces bandes. Il semble donc plutôt que ce soit la forme allongée des grains d'austénite dans des directions, elles aussi proches de 45° , qui constitue un obstacle et limite le développement de bandes de localisation dans la nuance industrielle. Il paraît donc nécessaire de tenir compte de la forme de la distribution des phases pour représenter le comportement du matériau.

Nous n'avons pas caractérisé plus précisément la géométrie des bandes de localisation apparaissant dans

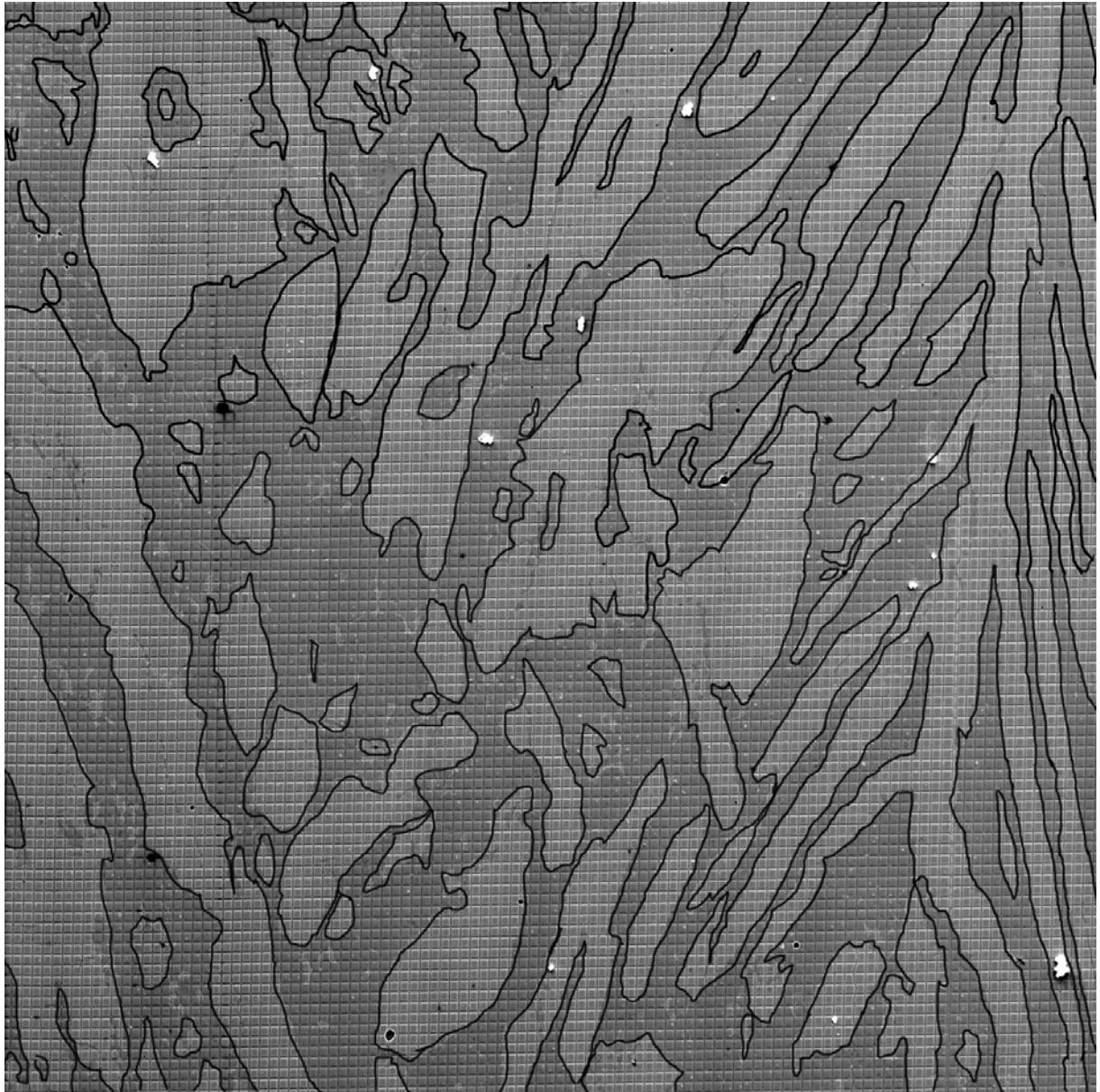


FIG. 5.44: Microstructure du matériau I (la ferrite est la phase sombre) avant essai (pixels carrés de $0.12\mu\text{m}$ de côté, pas de grille de $5\mu\text{m}$, taille de l'image 4000×4000 pixels carrés), les phases sont délimitées par un trait fort, d'après [149].

ces matériaux. Néanmoins, certains auteurs se sont intéressés plus finement à ces aspects nous en citons deux pour mémoire [48, 47]. Si les cartes de déformation peuvent nous permettre de comprendre qualitativement la partition des déformations interphases, la quantification plus précise de ces phénomènes nécessite de restreindre et de simplifier l'information fournie par ce dépouillement. Nous allons, dans ce but, représenter les histogrammes de déformations logarithmiques équivalentes au sein des différentes microstructures (figure 5.48), ce qui revient à ignorer toute l'information spatiale fournie par les cartographies. Les densités macroscopiques (courbes noires) révèlent que les déformations apparaissant au sein du matériau D sont plus hétérogènes que celles du matériau I. Cette distinction se retrouve lorsque l'on considère la distribution des déformations par phase pour les deux matériaux. En effet, alors que le matériau modèle présente des densités par phase bien distinctes, celles du matériau industriel restent très proches. Ces observations peuvent s'expliquer si l'on considère que l'austénite limite plus la déformation dans le cas de la microstructure I que dans celui de la microstructure D. Cet effet est probablement lié

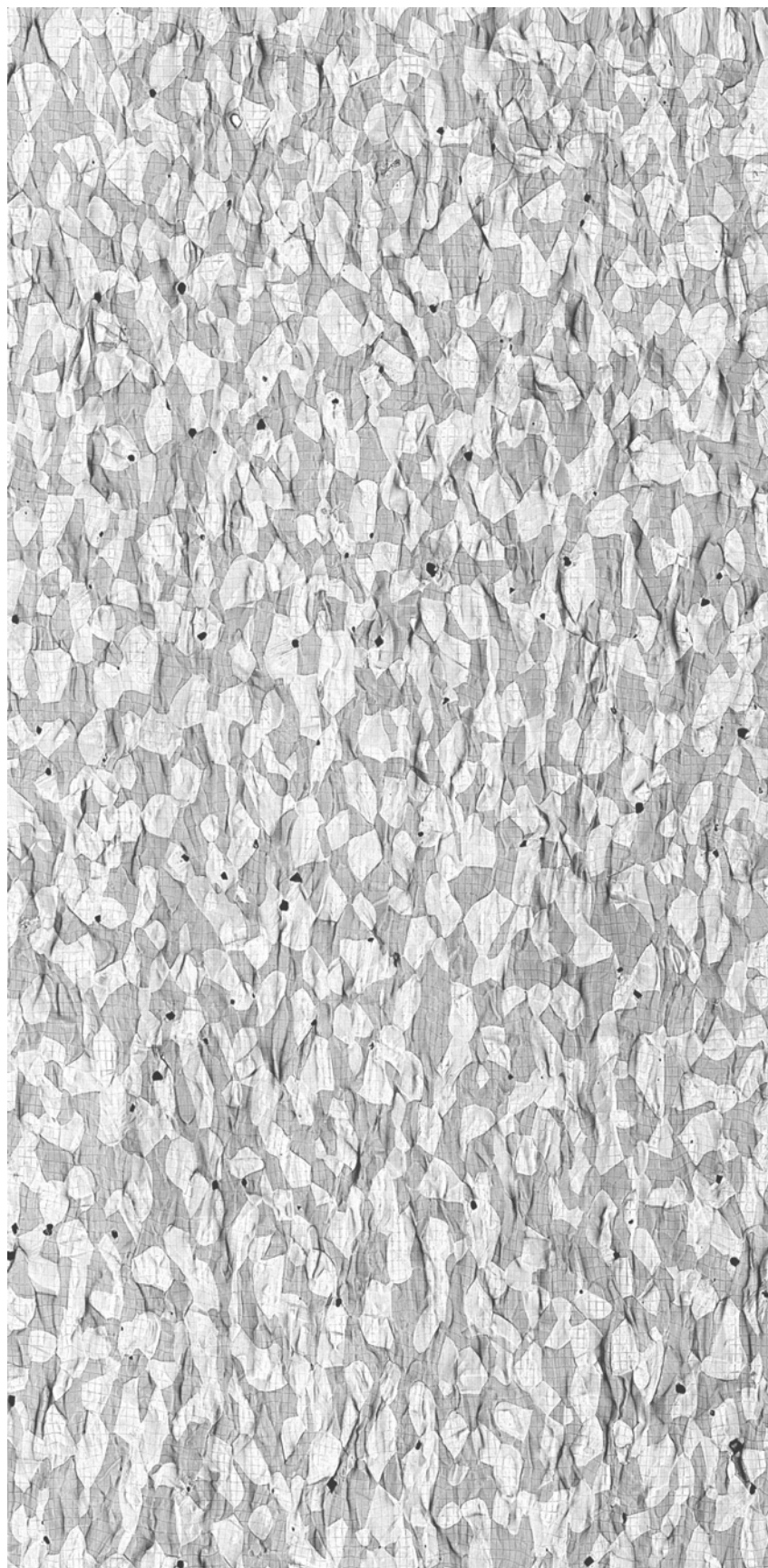


FIG. 5.45: Microstructure du matériau D après essai, d'après [73]. Cette figure est tournée de $+90^\circ$ par rapport à la figure 5.43 (axe de compression horizontal). La ferrite est la phase sombre.

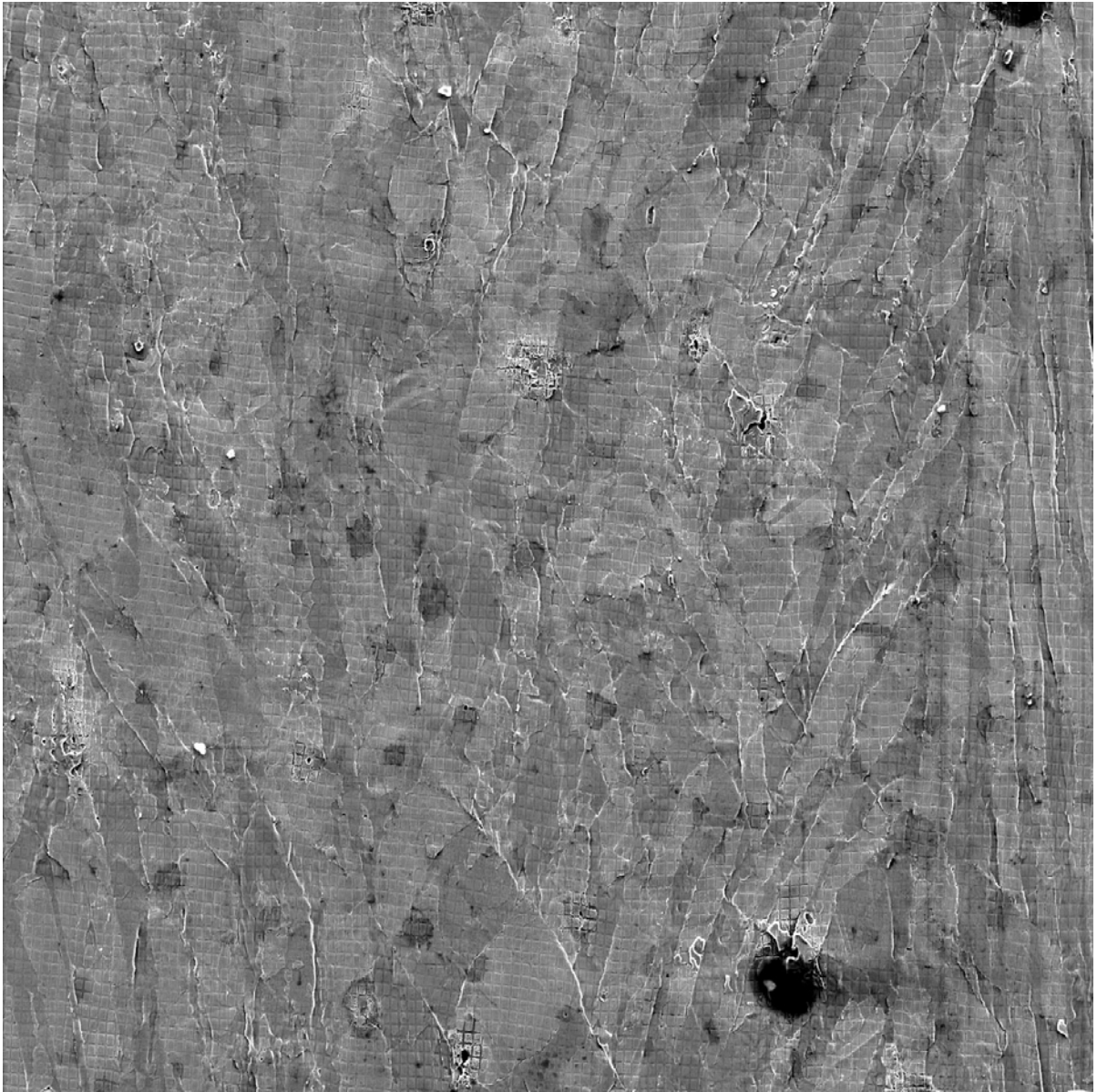
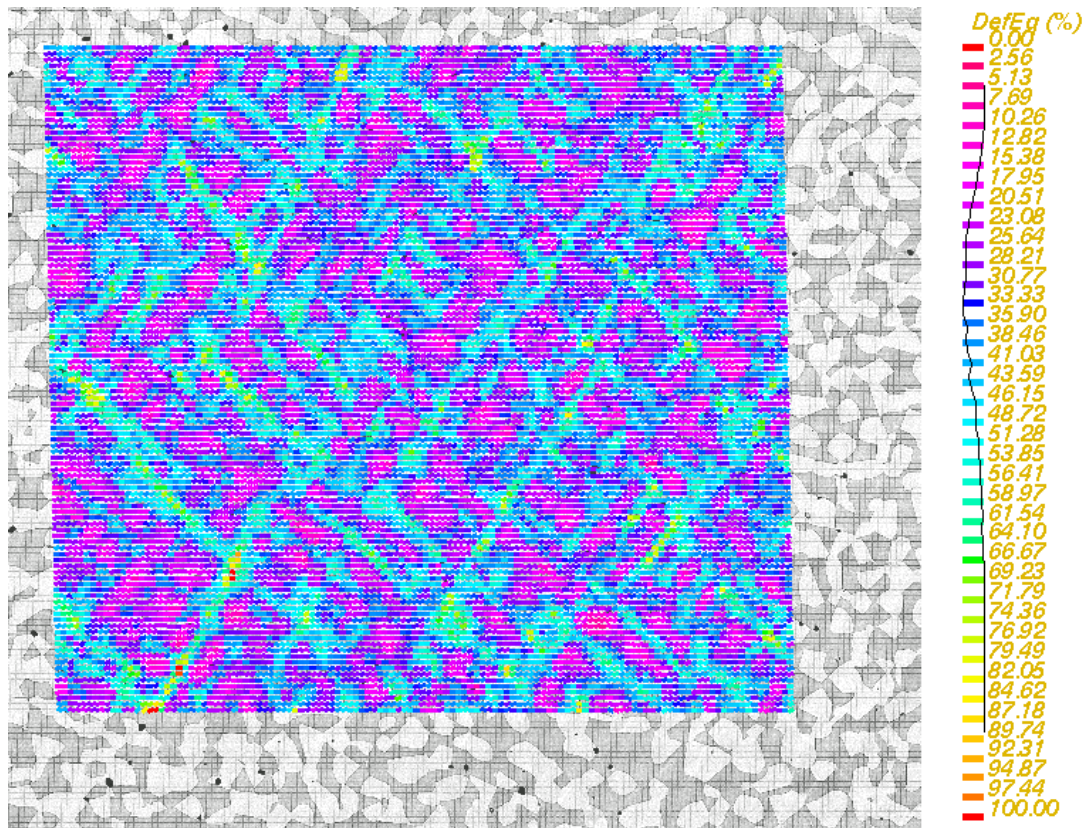
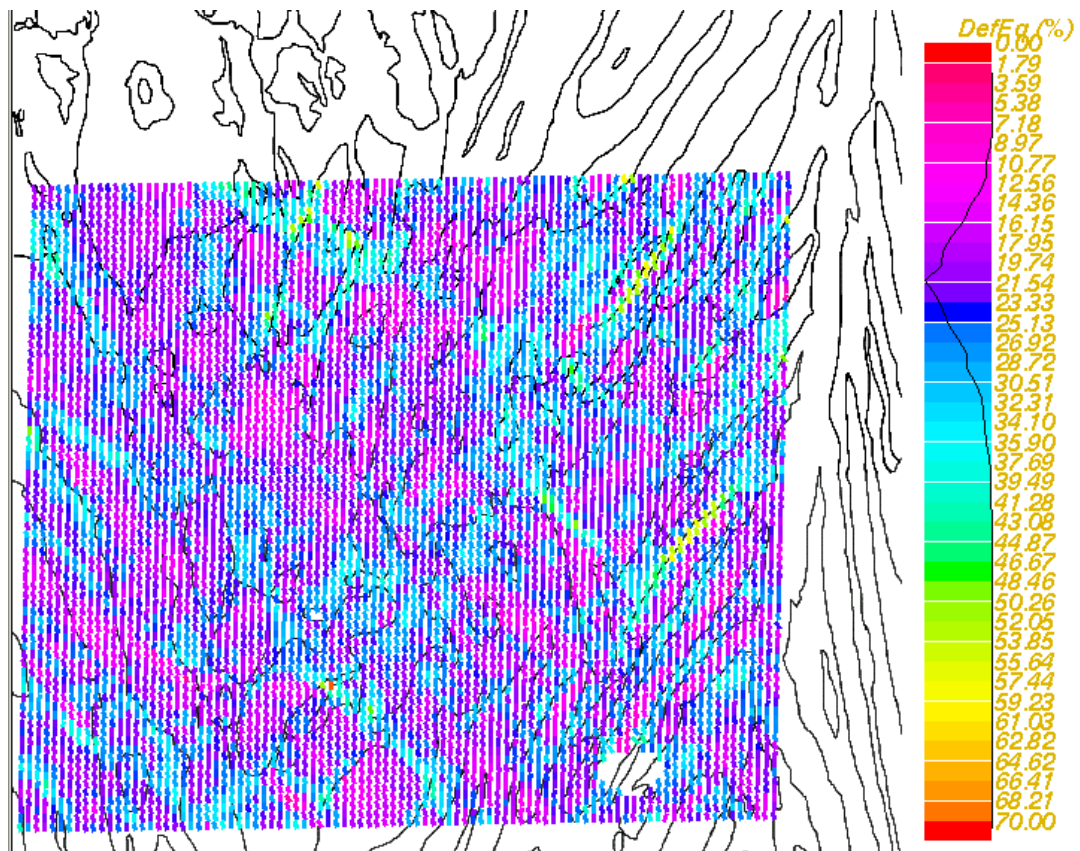


FIG. 5.46: *Microstructure du matériau I après essai, d'après [149]. La ferrite est la phase sombre.*

à la répartition des îlots de phase dure qui peuvent plus ou moins “gêner” la déformation de la phase molle et qui vont limiter l'apparition et le développement de bandes de localisation dans cette phase. Pour compléter l'information présentée à la figure 5.48, la table 5.4 donne les moyennes des déformations obtenues pour chaque phase et pour chacune des microstructures. Sur cette table, la déformation logarithmique moyenne par phase est obtenue à l'aide des contours introduits à la figure 5.34(b). Les fonctions de répartition déduites des densités précédentes et représentées figure 5.49, nous permettent d'estimer le rapport ferrite/austénite mis en jeu au sein des bandes de localisation. La table 5.5 présente ce rapport de composition pour le domaine des X pourcents les plus déformés du matériau. Ces résultats montrent que, dans le cas du matériau modèle, la ferrite accommode beaucoup plus la déformation que pour l'autre microstructure. Ces différences d'accommodation de la déformation ont déjà été observées dans la littérature. Elles sont, en général, associées par les auteurs à des différences morphologiques, conclusion à laquelle nous parvenons également.



(a) Matériau D (axe de compression vertical).



(b) Matériau I (axe de compression horizontal).

FIG. 5.47: Déformation logarithmique représentée sous forme de l'équivalent de von Mises pour les deux microstructures précédentes.

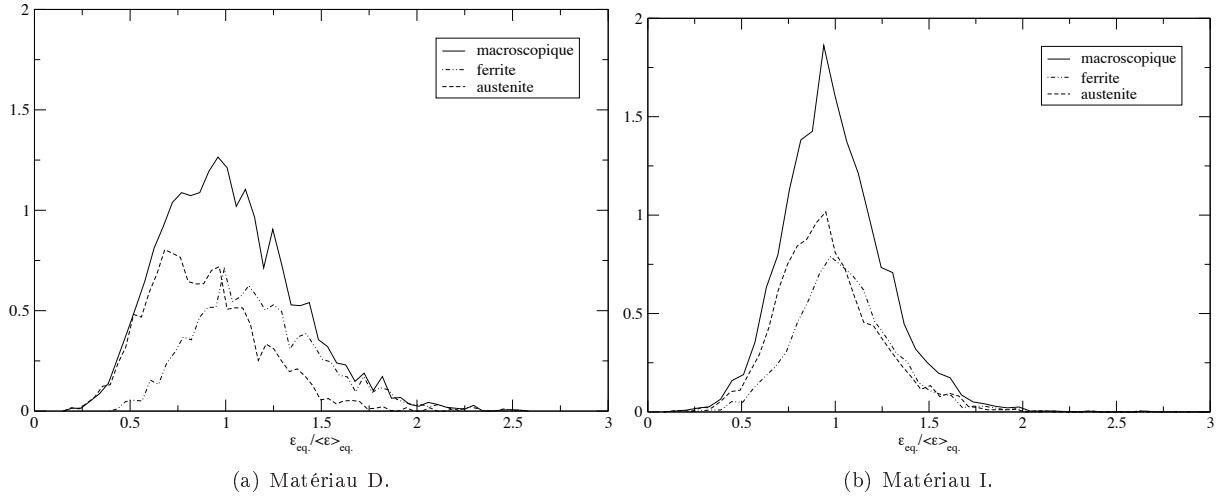


FIG. 5.48: Histogrammes des déformations logarithmiques équivalentes (au sens de von Mises) normalisées pour les deux microstructures précédentes. L'intégrale des densités par phase se rapporte à la fraction volumique du composant considéré.

		ε_{DN}^+	ε_{DL}^+	ε_{DT}^+	ε_{eq}^+	ε_{DN}^-	ε_{DL}^-	ε_{DT}^-	ε_{eq}^-
Macroscopique	Matériau D	-31.66	26.31	5.35	34.41	/	/	/	/
	Matériau I	-17.58	18.93	-1.35	21.78	/	/	/	/
Austénite	Matériau D	-29.80	24.68	5.12	32.35	-26.94	22.43	4.51	29.31
	Matériau I	-17.38	18.83	-1.45	21.60	-15.68	17.88	-2.2	19.93
Ferrite	Matériau D	-34.11	28.20	5.91	37.01	-35.98	29.87	6.11	39.09
	Matériau I	-18.84	19.62	-0.78	23.06	-17.94	19.07	-1.13	22.19

TAB. 5.4: Moyennes des déformations logarithmiques. Les composantes diagonales ainsi que l'équivalent de von Mises sont exprimés en pourcents. La notation ε^+ désigne un calcul "avec interface", et la notation ε^- un calcul "sans interface", cette distinction n'existe naturellement pas sur la déformation macroscopique.

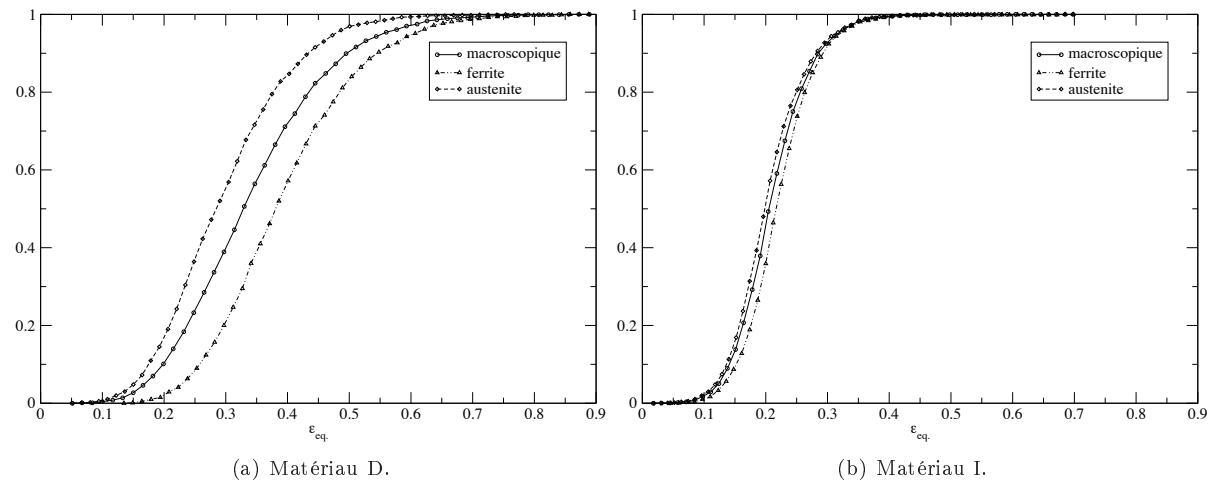


FIG. 5.49: Fonctions de répartition de la déformation pour les deux microstructures considérées. Contrairement à la figure 5.48, cette représentation est normalisée par la fraction volumique de chaque phase.

X% les plus déformés du matériau		1%	5%	10%	20%	30%
Concentration en ferrite (%)	Matériau D	89.5	85.3	83.7	75.9	73.4
	Matériau I	55.2	51.1	52.8	57	59.3

TAB. 5.5: Concentration en ferrite des zones du matériau les plus déformées (en pourcents).

5.3.4 Bilan

Le dépouillement de deux cartographies a montré l'importance que semble avoir la forme de la microstructure lorsque l'on considère un matériau biphasé polycristallin. Quand des bandes de localisation de la déformation peuvent apparaître, la matrice ferritique accommode beaucoup plus la déformation que les îlots austénitiques. Une modélisation correcte du comportement des aciers inoxydables austéno-ferritiques devrait donc pouvoir reproduire ce type de phénomènes. De plus, cette observation coïncide avec celles faites à l'échelle macroscopique (figure 5.24) où le comportement à saturation semble peu dépendant de la fraction d'austénite présente dans le matériau. Si la déformation est principalement localisée dans la ferrite, ce phénomène se justifie bien.

Nous avons pu voir à travers cette analyse que ce type de mesure de champ de déformation permet une meilleure compréhension des mécanismes apparaissant à l'échelle microstructurale. En effet cette technique permet à la fois une visualisation des zones concentrant les déformations les plus importantes et la caractérisation statistique de la déformation au sein de chacune des phases. Malgré tout cette méthode ne fait qu'estimer la déformation réelle du matériau à travers une mesure bidimensionnelle des champs de déplacement ce qui est certainement insuffisant dans certaines situations. Ici, la déformation hors plan prévue suivant l'hypothèse d'incompressibilité étant faible, table 5.4, cette méthode paraît assez justifiée. On notera également que cette démarche est assez complexe et qu'en conséquence les expériences doivent souvent être répétées afin d'obtenir un résultat exploitable. Cette difficulté a fortement limité le nombre de résultats traités dans ce travail. De plus, le dépouillement d'une cartographie peut être fastidieux, même à l'aide d'un outil tel que CORRELMANUV, du fait de l'amplitude des déplacements mis en jeu et de l'impossibilité d'obtenir des images intermédiaires entre l'état initial et l'état déformé. Dans un tel contexte, l'obtention simultanée d'une micro-grille utilisable et d'une caractérisation EBSD s'avère très difficile. Il faudra sans doute fiabiliser la procédure d'essai sur grilles pour un tel matériau avant de pouvoir espérer atteindre un tel résultat.

Conclusion

Dans la partie bibliographique comme dans la partie précédente, nous avons remarqué des spécificités frappantes concernant l'écoulement à haute température des polycristaux austéno-ferritiques. Nous allons maintenant récapituler ces aspects que nous chercherons à modéliser dans la suite de notre travail.

Les données présentées par [4] et [205] (figures 1.19 et 1.18) font apparaître des croisements et des inversions des courbes contraintes/déformations macroscopiques pour des fractions de phases différentes. En particulier, on observe parfois des biphasés riches en phase dure exhibant un comportement plus mou que des biphasés comprenant moins de phase dure. Al-Jouni a supposé que ces observations étaient liées à des différences de texture pouvant exister entre les matériaux. Vernusse, quant à lui, a associé ces phénomènes à des différences de distribution des phases. Les données de Brown présentent un "effet biphasé" encore plus net car d'après ses résultats le comportement du polycristal est dominé par le comportement de la phase molle. Toutes les courbes contrainte/déformation pour le biphasé saturent à proximité du régime stationnaire de la ferrite. Cette localisation semble pouvoir être expliquée par les observations réalisées à l'échelle locale sur un essai mené par Hernandez Castillo. La comparaison de cet essai avec les résultats obtenus sur une nuance industrielle présentant une microstructure différente semble confirmer l'importance de la distribution des phases sur le comportement du biphasé, car pour une microstructure plus allongée et présentant des orientations d'îlots durs à 45°, la localisation de la déformation est inhibée. Les données de Brown, comme celles d'Al-Jouni, présentent également des comportements qui sont parfois plus mous que ceux des phases pures. Ce phénomène suggère l'existence d'un autre mode de déformation.

Nous allons tenter de vérifier, dans la suite, que ces différences de comportement peuvent effectivement être dues à des effets morphologiques.

Chapitre 6

Application aux matériaux réels

Sommaire

6.1	Modélisation de l'écrouissage	164
6.1.1	Modèle isotrope	164
6.1.2	Modèle anisotrope	165
6.1.3	Modèle basé sur les seconds moments	166
6.2	Identification des paramètres d'écrouissage	167
6.3	Comparaisons modèle/expérience à l'aide des paramètres identifiés	169
6.3.1	Comparaison des écoulements macroscopiques	170
6.3.1.a	Modélisation auto-cohérente classique	170
6.3.1.b	Utilisation des modèles à deux transitions d'échelles	171
6.3.2	Analyse des écoulements locaux	177
6.3.2.a	Cas du matériau industriel I	177
6.3.2.b	Cas du matériau modèle D	179
6.3.2.c	Information statistique d'ordre supérieur	184
6.3.3	Prévision de l'évolution morphologique	189
6.3.3.a	Prévision de textures	189
6.3.3.b	Symétrie de répartition des phases	190
6.4	Influence de la texture ou de la microstructure initiale	191
6.5	Influence de l'écrouissage et du contraste interphase	193

Introduction

Le chapitre 4 a montré que des effets liés à la répartition des phases dans le matériau pouvaient être observés dans des conditions de contraste et de non linéarité particulières données. Mais ces observations ont été réalisées uniquement dans des situations théoriques et ne peuvent donc s'appliquer, directement, dans le cas de matériaux réels.

Afin de prolonger notre analyse, des résultats expérimentaux étaient nécessaires, ces derniers ont été rapportés au chapitre 5. Les données expérimentales précédentes ne sont pas parfaites et souffrent, en particulier, de ne pas avoir pu, toutes être obtenues à partir d'un même matériau. Néanmoins, ayant conscience de cette imperfection, nous avons souhaité réaliser quelques comparaisons avec le modèle proposé afin de chercher à valider l'effet potentiel de l'agencement des phases.

Afin de passer des cas tests réalisés précédemment à la modélisation d'un matériau réel, il nous faut intégrer le phénomène d'écrouissage. Cet aspect est fondamental pour la description de l'écoulement plastique (ou viscoplastique) des métaux. Les mécanismes physiques responsables de ces phénomènes ont été brièvement évoqués au chapitre 1. Dans le cadre de notre modèle, dont la cinématique se base sur le glissement le long des plans réticulaires (§2.2.1), l'écrouissage peut apparaître sous la forme d'une relation liant les quantités de glissement à l'évolution des cissons de références. La nécessité de reproduire l'aspect saturant du comportement macroscopique impose une contrainte supplémentaire sur cette évolution. Cette observation nous a conduit, à l'instar de nombreux auteurs, à considérer une loi de Voce [206, 207] généralisée [198, 199, 120, 99] pour décrire l'écrouissage.

Les paramètres de cette loi étant identifiés à partir des courbes d'écoulement macroscopiques des phases pures, il devient possible de tester l'adéquation des différents modèles avec les observations expérimentales, en termes de comportement effectif, d'écoulement local et d'évolution de microstructure pour le matériau biphasé.

6.1 Modélisation de l'écrouissage

Il existe un grand nombre de formulations pour décrire l'écrouissage à l'échelle locale d'un milieu cristallin; on trouvera une revue claire de quelques-unes de ces approches dans la thèse de Héraud [83]. Ces lois se basent, en général, sur la quantité de glissement ou sur la densité de dislocations présentes dans le matériau¹. Nous avons choisi ici une loi d'écrouissage locale très utilisée dans la littérature lorsque l'on considère, en suivant Hutchinson [82], des écoulements locaux en loi puissance. Cette loi, introduite semble-t-il à l'échelle locale par [198], prend une forme proche de celle obtenue au chapitre 1 dans le cadre du modèle de Kocks [96]. Elle a donc plutôt vocation à décrire un écrouissage dominé par les mécanismes de restauration.

Dans sa formulation initiale [198, 79, 200], cet écrouissage agissait de façon identique sur tous les systèmes des familles d'orientations. Cette approche sera qualifiée "d'isotrope"². Ce modèle a ensuite été généralisé ([199] par exemple) afin de permettre une évolution hétérogène des systèmes de glissement au sein d'une même famille d'orientations. Cette deuxième description sera dite "anisotrope". Ces deux formulations ont en commun de ne faire intervenir qu'un même paramètre interne $\Gamma^{(r)}$ pour définir l'écrouissage de tous les systèmes de la famille de grains r .

6.1.1 Modèle isotrope

L'idée du modèle de Voce généralisé est de décrire la relation entre le durcissement des systèmes et une variable décrivant la structure interne du matériau. Comme le montre le schéma de la figure 6.1, cette modélisation décrit la transition d'une relation linéaire à une autre, asymptotique, de pente généralement plus modérée. Le paramètre régissant cette loi est le glissement cumulé sur tous les systèmes $\Gamma^{(r)}$. La loi de Voce prend ainsi la forme (6.1), où $\tau_0^{(r)}$, $\tau_1^{(r)}$, $\theta_0^{(r)}$ et $\theta_1^{(r)}$ sont des paramètres d'ajustement.

$$\tau_c^{(r)} = \tau_0^{(r)} + \left(\tau_1^{(r)} + \theta_1^{(r)} \Gamma^{(r)} \right) \left[1 - \exp \left(- \left| \frac{\theta_0^{(r)}}{\tau_1^{(r)}} \right| \Gamma^{(r)} \right) \right] \quad \text{avec} \quad \dot{\Gamma}^{(r)} = \sum_k \left| \dot{\gamma}_{(k)}^{(r)} \right| \quad (6.1)$$

¹On notera que cette dernière catégorie fait intervenir des variables d'état et ne nécessite donc pas de connaître toute l'histoire du matériau.

²Un incrément de glissement rigidifie de façon identique chaque système du grain.

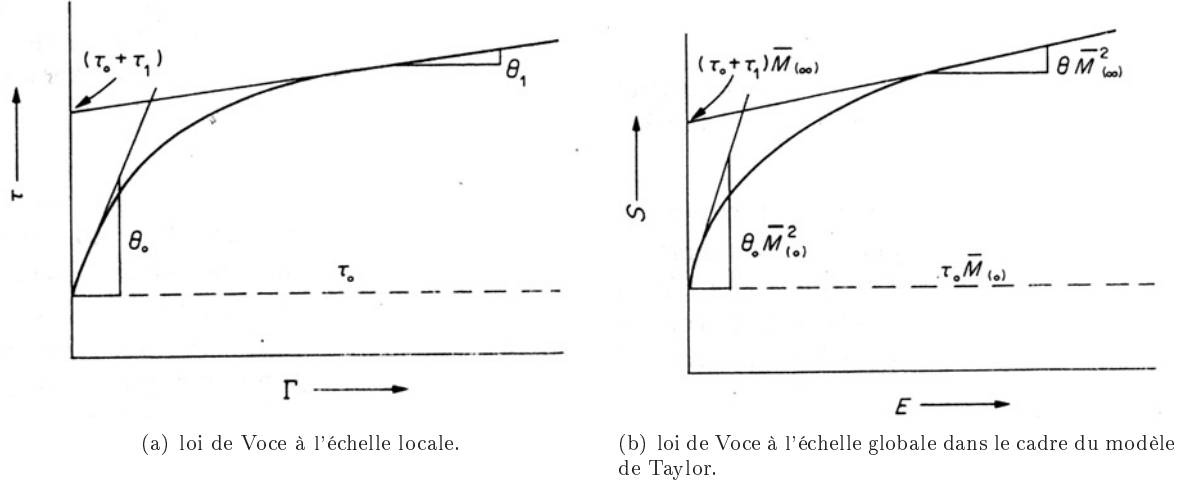


FIG. 6.1: Interprétation géométrique des paramètres de la loi de Voce généralisée, d'après [198].

Le comportement initial et asymptotique de (6.1) est donné par les relations suivantes :

$$\tau_c^{(r)} \underset{\Gamma \rightarrow 0}{=} \tau_0^{(r)} + \operatorname{sgn}(\tau_1^{(r)}) \left| \theta_0^{(r)} \right| \Gamma^{(r)} + o\left(\Gamma^{(r)2}\right) \quad (6.2a)$$

$$\tau_c^{(r)} \underset{\Gamma \rightarrow +\infty}{=} \tau_0^{(r)} + \tau_1^{(r)} + \theta_1^{(r)} \Gamma^{(r)} + o(1) \quad (6.2b)$$

De plus, lorsque $\tau_1^{(r)}$ tend vers 0, l'écroutissage devient linéaire sur toute la plage de variation de $\Gamma^{(r)}$:

$$\tau_c^{(r)} = \tau_0^{(r)} + \theta_1^{(r)} \Gamma^{(r)} \quad (6.3)$$

Pour un tel modèle, l'approche de Taylor fournit, de façon simple, la description de la courbe d'écroutissage macroscopique (figure 6.1) à condition de connaître les facteurs de Taylor³ initiaux et finaux du matériau notés respectivement $\bar{M}(0)$ et $\bar{M}(\infty)$. Cette propriété rend ce modèle d'écroutissage simple très attractif. La relation (6.1) présente également l'intérêt de fournir une équation définissant de façon univoque $\tau_c^{(r)}$ à partir de $\Gamma^{(r)}$. Il n'y a donc pas lieu d'utiliser une forme incrémentale, contrairement au cas de la formulation anisotrope qui va être présentée dans la section suivante, pour déterminer $\tau_c^{(r)}$ à chaque instant.

6.1.2 Modèle anisotrope

Il est, en général, nécessaire de disposer d'une loi d'écroutissage traitant de façon différente les différents systèmes d'une même famille d'orientations cristallographiques. Et ce, notamment, pour les cristaux très anisotropes de matériaux métalliques tels que le zirconium et le titane ou de certains matériaux géologiques tels l'olivine. Il était donc souhaitable de généraliser la formulation précédente aux cas d'évolutions différentes pour des systèmes distincts. L'idée de [199] est d'utiliser la formulation précédente (6.1) sous une forme généralisée (6.4), où k désigne le système considéré.

$$\tau_{c(k)}^{(r)} = \tau_0^{(r)} + \left(\tau_1^{(r)} + \theta_1^{(r)} \Gamma^{(r)} \right) \left[1 - \exp \left(- \left| \frac{\theta_0^{(r)}}{\tau_1^{(r)}} \right| \Gamma^{(r)} \right) \right] \quad (6.4)$$

Cette expression se réécrit sous forme incrémentale suivant (6.5).

$$d\tau_{c(k)}^{(r)} = \left[\theta_1^{(r)} + \left(\theta_0^{(r)} - \theta_1^{(r)} + \theta_1^{(r)} \frac{\Gamma^{(r)} \theta_0^{(r)}}{\tau_1^{(r)}} \right) \exp \left(- \frac{\Gamma^{(r)} \theta_0^{(r)}}{\tau_1^{(r)}} \right) \right] d\Gamma^{(r)} \quad (6.5)$$

³Pour plus de précisions sur ces grandeurs, on pourra se reporter à [198] et [61].

Jusqu'ici, le fait d'introduire une cission de référence τ_c par système ne définit pas d'hétérogénéité de raideur au sein d'un même grain. Il faut pour cela faire évoluer de façons différentes ces variables en fonction des glissements qui apparaissent dans le matériau. C'est pourquoi Tomé [199] introduit un facteur supplémentaire, faisant apparaître une matrice d'écrouissage, et permettant de prendre en compte aussi bien l'auto-écrouissage (durcissement d'un système du fait de son activité propre) que l'écrouissage latent (durcissement du fait de l'activité d'autres systèmes). On obtient ainsi l'expression (6.6) utilisée dans plusieurs études [199, 120, 99], l'expression de $\Gamma^{(r)}$, quant à elle, reste identique à celle donnée par (6.1).

$$d\tau_{c(k)}^{(r)} = \left[\theta_1^{(r)} + \left(\theta_0^{(r)} - \theta_1^{(r)} + \theta_1^{(r)} \frac{\Gamma^{(r)} \theta_0^{(r)}}{\tau_1^{(r)}} \right) \exp^{-\frac{\Gamma^{(r)} \theta_0^{(r)}}{\tau_1^{(r)}}} \right] \sum_{k'} h_{kk'} \left| \dot{\gamma}_{(k')}^{(r)} \right| dt \quad (6.6)$$

Dans la formulation anisotrope, il peut paraître surprenant de ne considérer qu'un seul paramètre $\Gamma^{(r)}$ par famille d'orientations. En effet, cette variable va raidir tous les systèmes de façon identique, la dissymétrie entre les systèmes de glissement d'une même famille d'orientations ne provenant que d'un facteur supplémentaire. On imagine que considérer une variable d'écrouissage par système doit permettre de mieux représenter l'anisotropie de l'écrouissage.

Nous proposons donc d'utiliser, ici, des variables $\Gamma_{(k)}^{(r)}$ définies à partir de l'équation (6.7).

$$\dot{\Gamma}_{(k)}^{(r)} = \sum_{k'} h_{kk'} \left| \dot{\gamma}_{(k')}^{(r)} \right| \quad (6.7)$$

L'équation régissant l'écrouissage prend ainsi la forme (6.8a) d'écriture incrémentale (6.8b).

$$\tau_{c(k)}^{(r)} = \tau_0^{(r)} + \left(\tau_1^{(r)} + \theta_1^{(r)} \Gamma_{(k)}^{(r)} \right) \left[1 - \exp^{-\left| \frac{\theta_0^{(r)}}{\tau_1^{(r)}} \right| \Gamma_{(k)}^{(r)}} \right] \quad (6.8a)$$

$$d\tau_{c(k)}^{(r)} = \frac{\partial \tau_{c(k)}^{(r)}}{\partial \Gamma_{(k)}^{(r)}} \sum_{k'} h_{kk'} \left| \dot{\gamma}_{(k')}^{(r)} \right| dt \quad (6.8b)$$

Cette reformulation présente plusieurs avantages, tout d'abord, elle permet de séparer la détermination du comportement asymptotique de τ_1 du choix de la matrice d'écrouissage. En effet, l'évolution des termes de la matrice $h_{kk'}$, dans le cas du modèle anisotrope, nécessite de réidentifier tous les paramètres de la loi de Voce pour retrouver les mêmes niveaux asymptotiques. Cette différence est liée au fait que (6.6) n'est pas la formulation incrémentale de (6.5), alors que (6.8b) dérive bien de (6.8a); les expressions asymptotiques de la forme (6.2) ne sont donc valides que dans la version reformulée. De plus, ce type d'écrouissage pourrait très facilement s'étendre à des matériaux pour lesquels les systèmes de glissement s'écrouiraient suivant des lois de Voce différentes⁴.

6.1.3 Modèle basé sur les seconds moments

Les descriptions de l'écrouissage évoquées précédemment reposent sur le glissement moyen le long des différents systèmes. Cette formulation ne représente peut-être pas tout à fait fidèlement la physique de l'écrouissage. En effet, si en termes de cinématique le glissement peut être représenté par son effet moyen, à l'échelle locale les fluctuations de vitesse de glissement contribuent à l'écrouissage du matériau. En particulier, considérer uniquement le taux de glissement moyen, c'est ignorer les contributions de sens opposé qui peuvent pourtant raidir le système. Pour remédier à ce défaut nous considérerons une approche inspirée des travaux de [30] dans une version très simplifiée. La modification de la loi consiste à remplacer $\langle \dot{\gamma}_{(k)} \rangle_r$ par $\sqrt{\langle (\dot{\gamma}_{(k)})^2 \rangle_r}$ en utilisant les seconds moments des champs mécaniques utiles également, comme on l'a vu au chapitre 3, pour d'autres raisons. L'effet de cet écrouissage par les seconds moments sera discuté brièvement par la suite.

Cette dernière proposition, consistant à faire évoluer l'écrouissage en fonction d'une grandeur potentiellement "plus riche" que la moyenne du taux de glissement, rappelle une limitation des modèles d'homogénéisation présentés jusqu'à maintenant. L'évolution de l'écrouissage, tout comme l'évolution de la texture

⁴La difficulté réside alors dans l'identification de tous ces paramètres.

cristallographique, pose le problème de l'hétérogénéité des champs au sein des constituants élémentaires du matériau (ici, les familles d'orientations cristallographiques). Le développement de cette hétérogénéité doit conduire à la redéfinition de ces constituants, tout comme la plastification locale d'une phase nécessite de définir la zone plastifiée différemment du reste de la phase non encore entrée dans le domaine plastique. Dans les modèles que nous proposons, une famille d'orientations évolue "en bloc", alors que, dans la réalité, les hétérogénéités doivent conduire à générer plusieurs familles d'orientations différentes à partir d'une unique famille de départ. Cette rediscrétisation, qui ne sera pas traitée dans le cadre de ce travail, est une condition nécessaire pour assurer la validité de l'hypothèse d'homogénéité par morceau des comportements locaux linéarisés. Il n'y a pas, aujourd'hui, de méthode claire permettant de tenir compte de cet aspect lors de la mise à jour du matériau. Malgré tout, les tendances récentes consistant à s'intéresser aux moments d'ordre supérieur pour la description des champs mécaniques fournissent des informations qui pourront certainement être utiles dans ce cadre.

6.2 Identification des paramètres d'écrouissage

L'identification des paramètres de la loi de Voce est réalisée pour chacune des phases pures en utilisant les données de Brown, introduites en §5.2.3. Nous supposons, par ailleurs, que cet écrouissage reste inchangé pour les deux phases lorsque celles-ci sont rassemblées au sein d'un matériau biphasé. L'identification de la sensibilité à la contrainte a déjà été réalisée dans le cas de ces deux phases à la section 5.2.3.a. Il faut donc maintenant déterminer les paramètres τ_0 , τ_1 , θ_0 et θ_1 relatifs à la ferrite et à l'austénite. Cette identification, tout comme la majorité des développements de ce chapitre, sera réalisée en considérant l'écrouissage isotrope introduit précédemment.

Le cas de la ferrite est assez simple, car le comportement présenté à la figure 5.21(a) est quasiment plastique parfait. Dans cette configuration τ_0 est alors le seul paramètre non nul. Afin d'identifier ce paramètre, nous allons utiliser le modèle auto-cohérent monophasé basé sur la formulation variationnelle de Ponte Castañeda et implémenté dans le cas d'un potentiel en loi puissance qui a été décrit au chapitre 3. Nous considérerons un tenseur microstructural égal à l'identité pour décrire la symétrie initiale de distribution des orientations dans le matériau, ce qui peut représenter, comme on l'a vu en §2.2.2.b, une distribution de grains équiaxes. De plus, l'utilisation d'une forme initiale sphérique inhibera l'évolution morphologique du matériau, comme l'a montré la figure 4.27, et fournira bien un niveau de contrainte constant. L'identification de ce niveau de contrainte est obtenu en considérant une courbe de référence décrivant l'évolution de la contrainte d'écoulement en fonction de la vitesse, pour une cisssion de référence unitaire. Du fait de l'homogénéité du potentiel macroscopique (§2.2.2), cette courbe est une fonction puissance de même exposant que celui de la loi d'écoulement locale, la connaissance de la contrainte pour une vitesse particulière suffit donc à la déterminer entièrement (cette donnée nous est fournie par la figure 4.9(b) par exemple). De cette relation et des trois niveaux de contrainte associés aux trois vitesses utilisées par Brown durant ses expériences, on peut déduire le facteur multiplicatif qu'il faut imposer à la cisssion de référence pour approcher au mieux les données. En effet, multiplier l'ensemble des cisssions de référence par un facteur λ conduit à multiplier la contrainte macroscopique par λ , comme on l'a vu §2.2.2.b. La mise en place de cette démarche aboutit à une valeur de 39 MPa pour τ_0 et aux courbes de la figure 6.2. Un ordre de grandeur similaire peut également être obtenu, dans ce cas, en utilisant les relations proposées par [198] dans le cadre du modèle de Taylor⁵.

Dans le cas de l'austénite, l'identification des paramètres de Voce est plus délicate. Les courbes de la figure 5.21(b) présentent, en effet, une évolution marquée avec la déformation. Cependant, le comportement reste saturant ce qui assure la nullité de θ_1 . Il est difficile de définir un niveau initial de contrainte sur les courbes, nous différons donc la détermination de τ_0 pour nous intéresser plutôt au niveau de contrainte asymptotique. La même méthode que celle utilisée dans le cas ferritique est appliquée, la courbe de référence pour une cisssion unitaire est donnée figure 6.3(a). Celle-ci nous permet d'estimer $\tau_0 + \tau_1$ à environ 53 MPa, ce qui correspond à l'approximation asymptotique présentée à la figure 6.3(b). Les faibles différences observées entre les deux exposants conservés jusqu'à maintenant justifient de n'en conserver qu'un seul, la suite de l'identification sera donc réalisée à partir de $n_\gamma = 7.5$ uniquement. Deux paramètres, τ_0 et θ_0 par exemple, doivent maintenant être estimés par approximations successives, ce qui

⁵En effet, en considérant le facteur de Taylor présenté à la figure 4.9(b) $\overline{M} \approx 2.7$ pour une vitesse de déformation unitaire dans le cas d'un essai de compression en déformation plane, on obtient $\tau_0 \approx 100/2.7 \approx 37$.

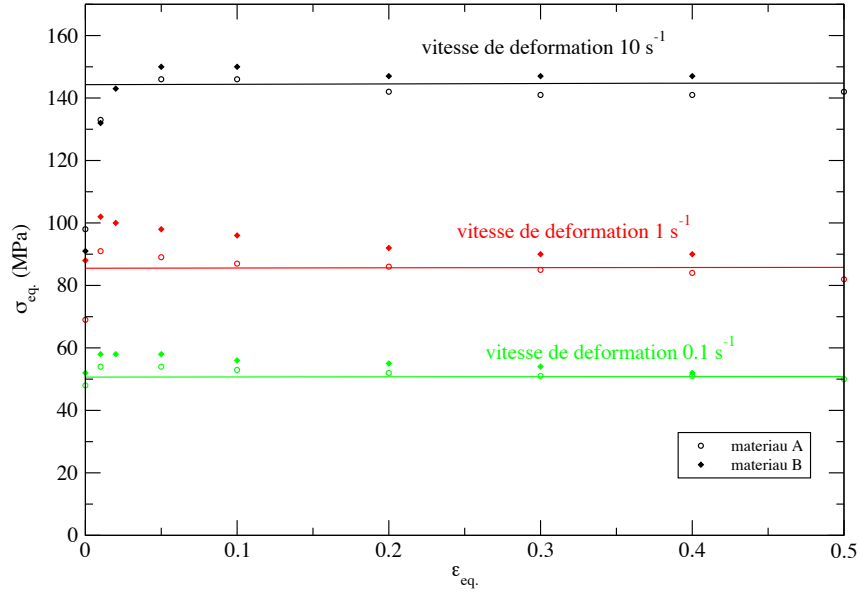


FIG. 6.2: Identification de la loi de Voce dans le cas de la ferrite à partir des données de la figure 5.21(a).

conduit après quelques essais aux choix présentés⁶ à la table 6.1.

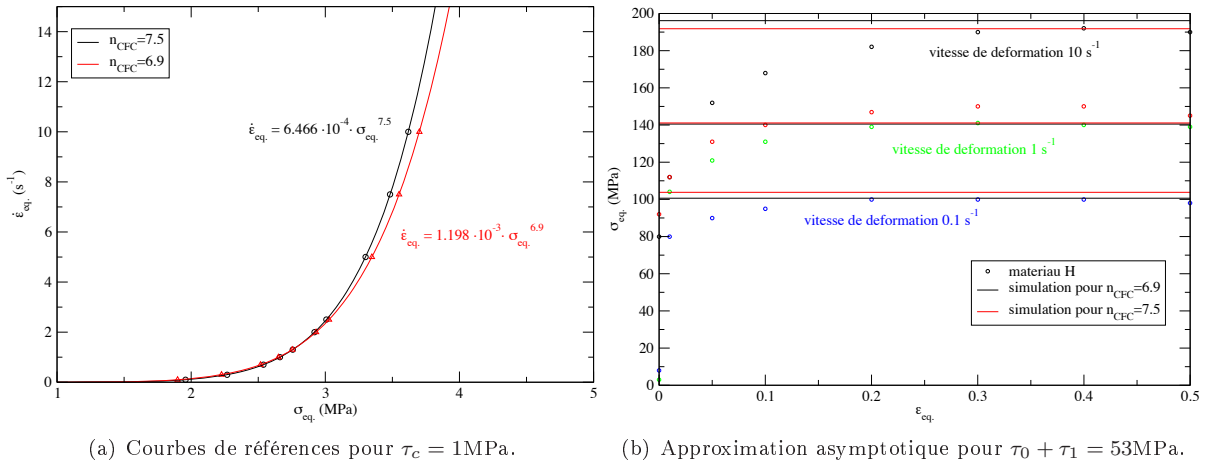


FIG. 6.3: Identification des paramètres d'écrouissage pour l'austénite.

phase pure	n	τ_0 (MPa)	τ_1 (MPa)	θ_0 (MPa)	θ_1 (MPa)
γ	7.5	20	33	300	0
α	4.4	39	0	0	0

TAB. 6.1: Valeurs identifiées pour l'austénite pure et la ferrite pure à partir des données de Brown dans le cas d'un écrouissage de Voce isotrope.

Il est à noter que lors de l'identification du niveau asymptotique $\tau_0 + \tau_1$, l'évolution de microstructure n'a pas été prise en compte. Néanmoins, en considérant les résultats présentés à la figure⁷ 6.4(a), il semble

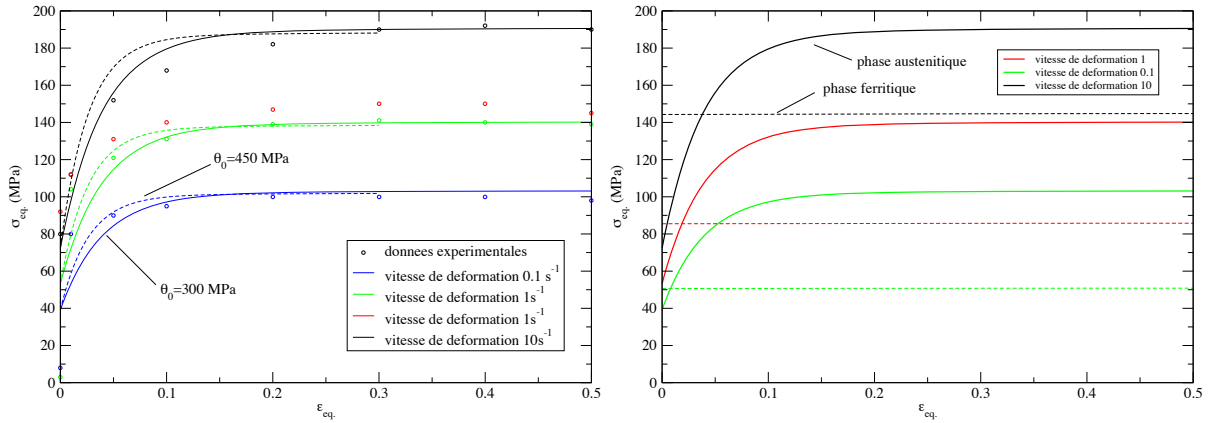
⁶Des paramètres proches de ceux identifiés ici ont été obtenus par [58] sur un autre couple de matériaux.

⁷Cette figure ne fait apparaître qu'une partie des données de Brown afin de clarifier le tracé.

que les modélisations soient assez satisfaisantes, excepté pour le début des courbes. Cette mauvaise prévision initiale est principalement liée au fait que la contrainte initiale ne semble pas varier suivant une loi puissance, observation qui a été faite à partir de la figure 5.23(a) lors de l'identification des exposants viscoplastiques. Les courbes en traits interrompus de la figure 6.4(a) donnent une idée de l'évolution de la réponse avec le paramètre θ_0 , cette évolution illustre la difficulté de l'identification des paramètres de la loi de Voce, simultanément, sur plusieurs courbes expérimentales.

De plus, l'écroutissage utilisé ne permet pas de reproduire l'effet d'évolution de la saturation avec la vitesse. En effet, les courbes expérimentales présentées à la figure 5.21(b) semblent atteindre leur niveau de contrainte maximum pour des déformations de plus en plus importantes. Alors que les courbes simulées saturent toutes autour des mêmes valeurs de déformation lorsque la vitesse de déformation imposée évolue.

Le graphique 6.4(b) donne une idée de l'évolution relative des courbes identifiées avec la vitesse. Cette identification propose donc un contraste interphase globalement décroissant avec la vitesse. On retrouve, en outre, la présence d'un croisement entre les courbes d'écoulement des phases pures. Ce phénomène traduit une dureté initiale plus importante de la ferrite que de l'austénite comme on l'a vu précédemment. Cette tendance s'inverse rapidement avec l'augmentation de la déformation du fait de l'écroutissage de la phase austénitique.



(a) Identification des paramètres d'écroutissage de l'austénite.

(b) Comportement des phases pures identifiées.

FIG. 6.4: Identification des paramètres d'écroutissage et écoulement des phases pures identifiées pour différentes vitesses de déformation.

6.3 Comparaisons modèle/expérience à l'aide des paramètres identifiés

L'identification des paramètres a été réalisée à partir des données de Brown [27], en considérant un écroutissage "isotrope", ce qui revient à utiliser le modèle anisotrope avec une matrice d'écroutissage telle que : $\forall (k, k'), h_{kk'} = 1$. On peut remarquer que, dans ce cas, les modèles "anisotrope" et "reformulé", présentés à la section précédente coïncident du fait de l'identité (6.9).

$$\dot{\Gamma}^{(r)} = \dot{\Gamma}_{(k)}^{(r)} = \sum_k \left| \dot{\gamma}_{(k)}^{(r)} \right| \quad \text{pour } \forall (k, k'), h_{kk'} = 1 \quad (6.9)$$

Malgré nos efforts pour approcher au mieux les données expérimentales en ajustant les paramètres d'écroutissage, l'approximation du comportement par le modèle reste moyenne. Une prédiction quantitative du comportement nécessiterait certainement une meilleure⁸ identification des paramètres de Voce et un ajustement simultané des coefficients de la matrice $h_{kk'}$.

Notre objectif n'étant ici que de donner des informations sur les tendances observées dans un tel matériau,

⁸En effet, dans le cadre d'une approche micro-mécanique, cette description du comportement local conditionne fortement la qualité du résultat final, les exigences de précision sur les caractéristiques élémentaires du matériau sont donc très fortes.

nous nous contenterons de cette identification rapide.

A partir de la modélisation du comportement des phases du matériau biphasé et de nos modèles d'homogénéisation non linéaires, nous allons tenter de comparer simulations et expériences en utilisant les informations issues des caractérisations expérimentales présentées au chapitre 5.

6.3.1 Comparaison des écoulements macroscopiques

Une première comparaison qui peut être faite entre modèle et expérience consiste à considérer l'écoulement effectif du matériau biphasé pour les différentes vitesses et les différentes fractions volumiques à notre disposition. Pour cela nous allons nous baser sur l'identification précédente et supposer que les phases s'écrouissent de la même façon dans un polycristal monophasé et dans un polycristal biphasé.

Il s'agit de voir, à travers ces comparaisons, si les modèles présentés dans les chapitres précédents permettent de reproduire les données expérimentales. De plus, nous souhaitons estimer le rôle que peut jouer l'aspect biphasé du matériau sur la prévision du comportement mécanique et essayer de savoir si ce paramètre peut être responsable des spécificités observées à l'échelle macroscopique et à l'échelle locale sur les matériaux présentés au chapitre 5.

6.3.1.a Modélisation auto-cohérente classique

Dans le cadre de ce travail, il est naturel de commencer par s'intéresser au modèle auto-cohérent à deux phases qui constitue une approche classique pour décrire un polycristal biphasé. La figure 6.5 présente, dans la colonne de gauche, les résultats obtenus pour différentes vitesses de déformation et différentes fractions d'austénite et de ferrite dans le cas des simulations auto-cohérentes et, dans la colonne de droite, les données de Brown [27] représentées à la même échelle.

Les courbes simulées évoluent régulièrement, de la phase molle à la phase dure, lorsque la fraction volumique d'austénite augmente. En particulier, les courbes relatives aux différentes fractions volumiques sont bien espacées, ce qui n'est pas le cas des données de Brown pour lesquelles les écoulements sont fortement regroupés au niveau de la phase molle. Cette différence semble d'autant plus marquée que la vitesse de déformation est importante. Les simulations sont donc systématiquement plus raides que les résultats expérimentaux.

Le modèle auto-cohérent semble ainsi ne pas pouvoir rendre compte des résultats de Brown. De plus, on peut noter que les courbes pour les différentes fractions volumiques sont bien ordonnées et qu'aucune interversion semblable à celles mises en évidence sur les données d'Al-Jouni (figure 1.19) ou de Vernusse (figure 1.18) n'a été rencontrée. Nous nous attendions à ce résultat car, à description morphologique constante, l'augmentation de la fraction de phase dure ne peut conduire qu'à un durcissement du matériau. Par contre, il peut paraître surprenant d'obtenir, avec un modèle auto-cohérent, des résultats aussi proches d'une "loi des mélanges" (figure 6.6). En effet, si l'on considère donnés les comportements de chaque phase, l'écoulement prévu par le modèle auto-cohérent biphasé pour les différentes fractions volumiques est proche de la courbe obtenue à partir de l'équation (6.10) qui caractérise la "loi des mélanges".

$$\sigma_{eq.}(\varepsilon_{eq.}) = c^\gamma \sigma_{eq.}^\gamma(\varepsilon_{eq.}) + c^\alpha \sigma_{eq.}^\alpha(\varepsilon_{eq.}) \quad (6.10)$$

Le modèle auto-cohérent étant inadapté, il s'agit maintenant de déterminer si le modèle à deux transitions d'échelles, décrit au chapitre 3 permet de répondre de façon plus satisfaisante à la problématique. Si tel est le cas, nous aurons une illustration forte de l'importance de la description de la répartition des phases dans le matériau.

Remarque : "exposant effectif" pour le biphasé

Avant de poursuivre notre étude, nous pouvons noter la variation de "l'exposant viscoplastique" effectif n du matériau biphasé, prévu par le modèle auto-cohérent⁹ (figure 6.7). Cette évolution peut être comparée qualitativement avec les mesures de Vernusse [205] pour une torsion à 1100°C sur un matériau différent. L'évolution prévue par le modèle en fonction de la fraction volumique de phase est quasiment linéaire, alors que celle mesurée par Vernusse s'écarte sensiblement d'une ligne droite. Il est difficile de savoir si

⁹En toute rigueur, le potentiel effectif du biphasé n'est plus une loi puissance pour des constituants présentant des exposants viscoplastiques distincts. Malgré tout, l'évolution, avec la vitesse, de la contrainte à la saturation reste souvent assez proche d'une loi puissance dont on peut identifier l'exposant en utilisant la méthode proposée en §5.2.3.a.

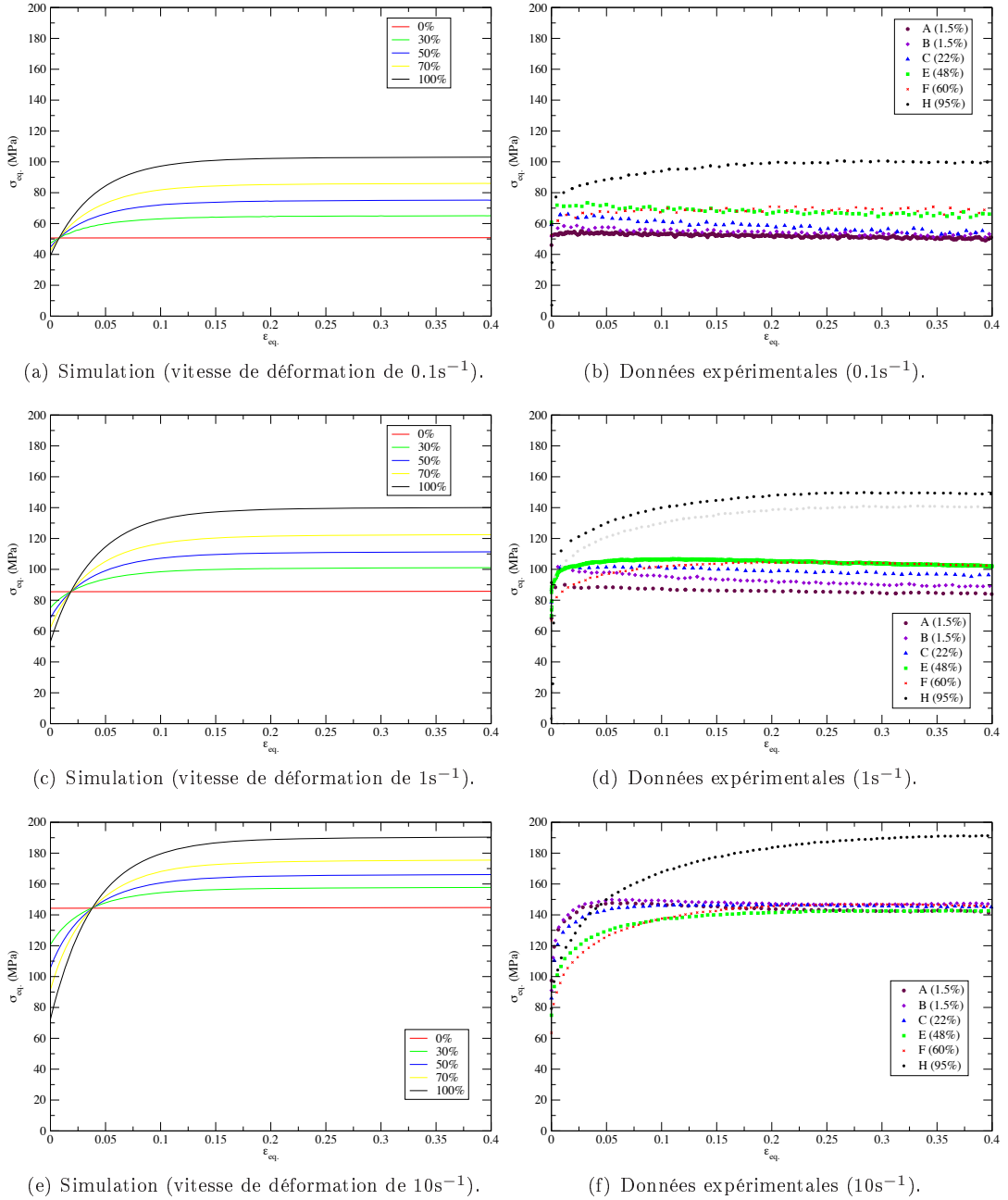


FIG. 6.5: (Colonne de gauche) Modélisation du comportement des polycristaux biphasés à l'aide d'un modèle auto-cohérent biphasé et des paramètres d'écrouissage identifiés à partir des phases pures de Brown. (Colonne de droite) Résultats expérimentaux de Brown obtenus à 1050°C . Les pourcentages précisés pour chacune des courbes se rapportent à la fraction d'austénite dans le matériau.

cette différence est imputable à un défaut de modélisation ou à une dispersion lors de la détermination expérimentale de ce paramètre.

6.3.1.b Utilisation des modèles à deux transitions d'échelles

Avant d'utiliser les modélisations à deux transitions d'échelles, nous pouvons essayer d'imaginer les résultats qui vont être obtenus en mettant à profit les caractérisations proposées au chapitre 4. Le contraste asymptotique¹⁰ entre les systèmes de glissement des deux phases est de l'ordre de 1.4, alors que la non

¹⁰ $\tau_c^\gamma(\Gamma = \infty)/\tau_c^\alpha(\Gamma = \infty) = (\tau_0^\gamma + \tau_1^\gamma)/\tau_0^\alpha = 53/39 \approx 1.36$.

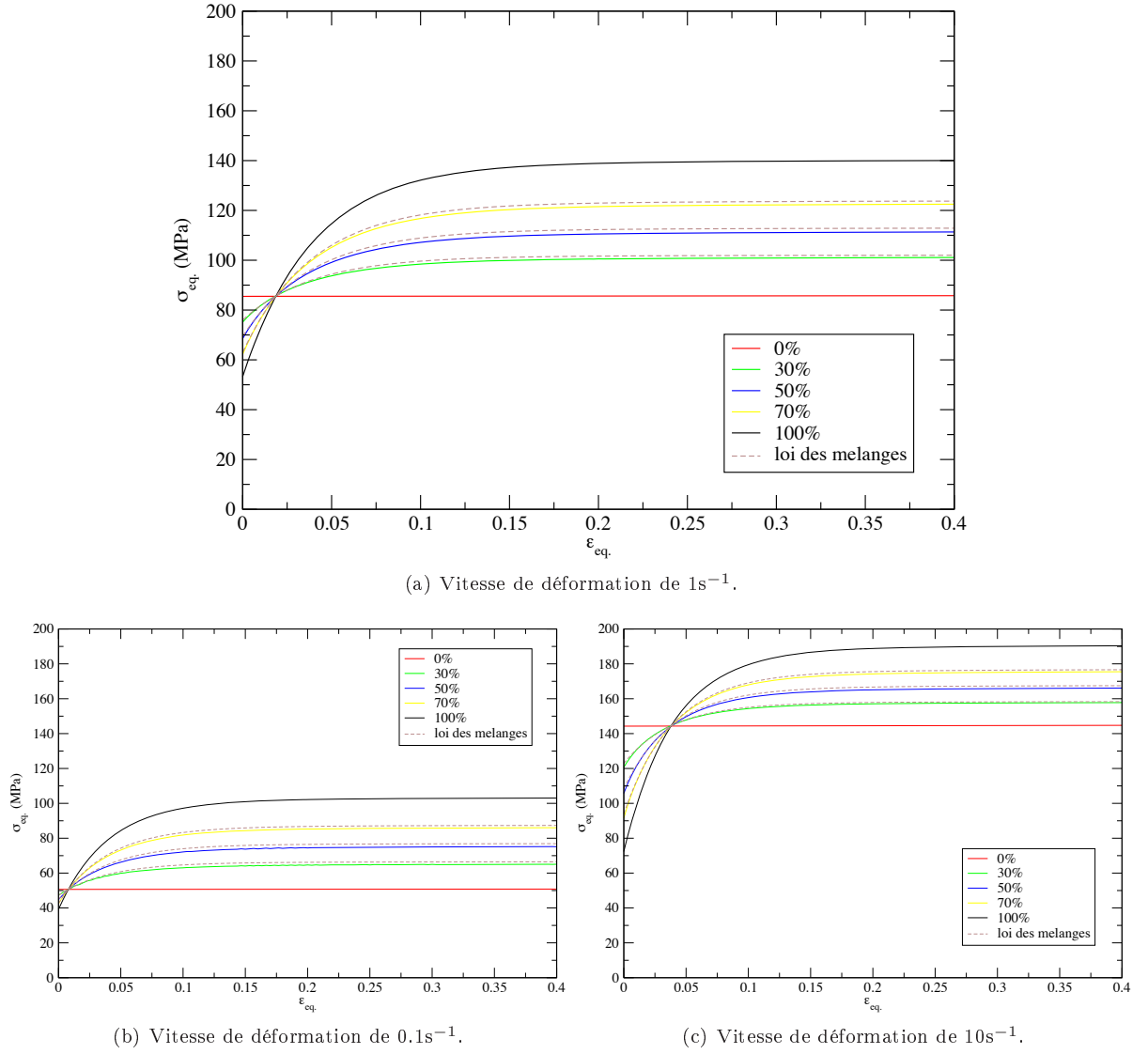


FIG. 6.6: Comparaison des résultats obtenus à l'aide du modèle auto-cohérent biphasé à ceux obtenus avec une "loi des mélanges".

linéarité des constituants est assez élevée : $n_\gamma = 7.5$ et $n_\alpha = 4.4$. Les résultats obtenus sur le matériau modèle et reproduits à la figure 6.8 suggèrent qu'il y aura peu d'effet lié à la répartition des phases, et que l'on devrait donc obtenir des résultats proches de ceux issus du modèle auto-cohérent biphasé. En superposant, sur la figure 6.9, les courbes d'écoulement obtenues dans le cas à deux transitions d'échelles, avec celles obtenues dans le cas de la modélisation auto-cohérente biphasée, on s'aperçoit que ces descriptions sont pratiquement identiques. De plus, on peut noter, en considérant les autres modèles d'assemblage de phases à notre disposition, que les modèles W/HS \pm et auto-cohérent sont quasiment confondus avec le modèle de Taylor, alors que l'écoulement expérimental peut, lui, se rapprocher des estimations¹¹ de Reuss ou de type 2R comme le montre la figure 6.10.

Nous voyons donc qu'à l'échelle de l'écoulement macroscopique du matériau, il n'y a pas de différence notable entre le modèle auto-cohérent biphasé classique et les modèles de type W/HS \pm qui se rapportent à une configuration "extrême" de l'assemblage de phases (§3.1.3). À ce niveau deux conclusions s'offrent à nous.

¹¹Dans le cas d'une évolution microstructurale, il n'y a plus de borne rigoureuse, du fait des évolutions différentes des matériaux en fonction du modèle utilisé. Ainsi les modèles de Voigt ou de Reuss constituent uniquement des estimations respectivement très dures et très molles du comportement du biphasé.

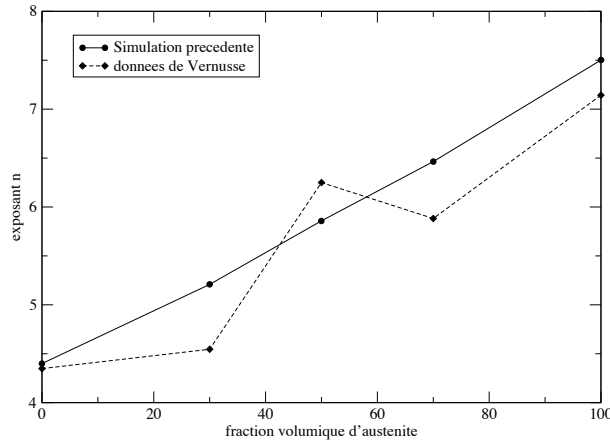


FIG. 6.7: Comparaison de l'évolution de l'exposant viscoplastique prévu par le modèle auto-cohérent à deux phases avec une évolution mesurée par Vernusse sur un autre matériau.

Nous pouvons imaginer qu'il n'y a pas d'effet de la morphologie dans le cas présent, c'est la conclusion que nous suggère l'identité des deux modèles. Le regroupement des courbes d'écoulement du matériau biphasé mis en évidence par Brown [27] serait alors dû à un autre phénomène, tel par exemple la présence d'une forte texture initiale.

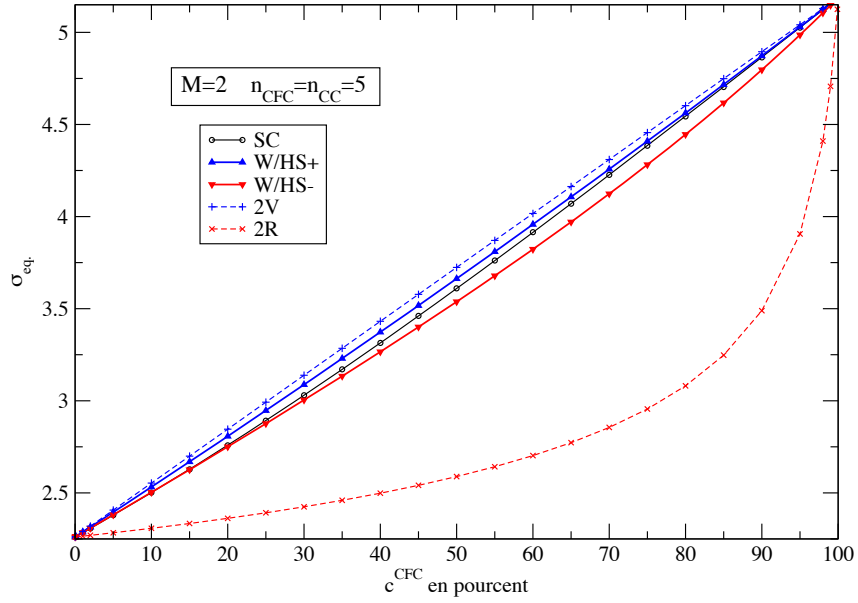
Nous pouvons également suggérer qu'il y a bien un effet morphologique, mais que nos modèles ne sont pas capables de mettre cet effet en évidence du fait de leur imperfection. L'hypothèse de séparation d'échelles peut, par exemple¹², être remise en cause en invoquant le fait que des organisations plus molles que W/HS- peuvent exister dans un contexte où il n'y a pas séparation d'échelles¹³.

Les grandes différences d'aspect des champs locaux, révélées par les techniques de grilles, nous font plutôt pencher vers une insuffisance de la modélisation. En effet, la présence de "bandes de localisation" fortement développées dans le cas de la microstructure modèle (figure 5.47(a)) et moins apparentes dans le cas de la microstructure industrielle (figure 5.47(b)), semble suggérer que certaines configurations microstructurales favorisent l'accommodation de la déformation dans la phase molle, alors que d'autres morphologies inhibent cette "localisation".

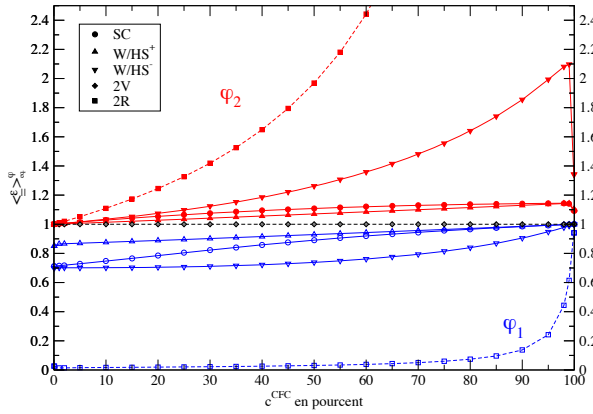
A ce niveau de la comparaison modèle/expérience, il semble que le modèle à deux transitions d'échelles soit aussi inadapté que la formulation auto-cohérente pour modéliser les données de Brown. Nous doutons ainsi de sa capacité à reproduire les effets qui semblent apparaître aux différentes échelles dans le matériau. Il est néanmoins légitime de poursuivre les comparaisons afin de confirmer cette tendance et, le cas échéant, de comprendre les raisons de la possible insuffisance de ce modèle.

¹²Les mêmes observations peuvent nous conduire à mettre en cause la technique de linéarisation choisie qui conduit, comme on l'a vu au §2.2.2.e et au §3.2.1, à des bornes supérieures pour le comportement instantané.

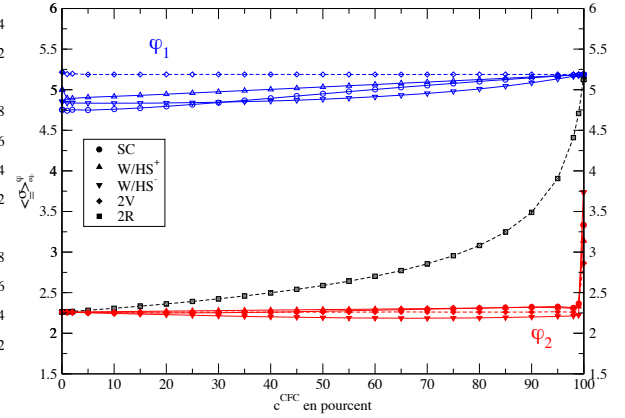
¹³La figure 6.10(c) semble aller dans ce sens en montrant la dureté excessive des modèles à deux transitions d'échelles, 2R y compris.



(a) Contrainte équivalente macroscopique.



(b) Taux de déformation équivalent moyen par phase.



(c) Contrainte équivalente moyenne par phase.

FIG. 6.8: Résultats macroscopiques et locaux pour un contraste de 2 et des exposants viscoplastiques n égaux à 5 dans l'austénite (φ_1) et dans la ferrite (φ_2). Toutes ces courbes sont présentées en fonction de la fraction volumique d'austénite.

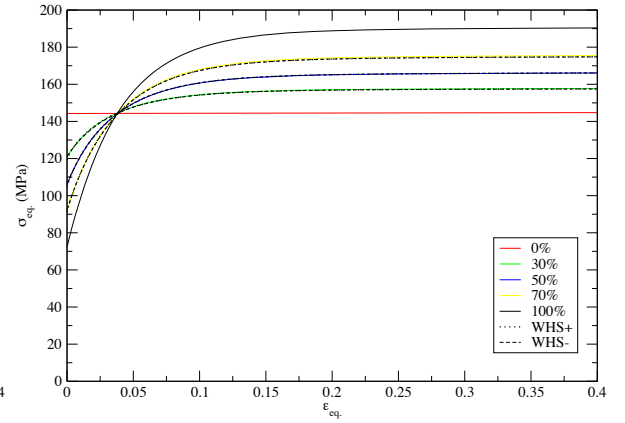
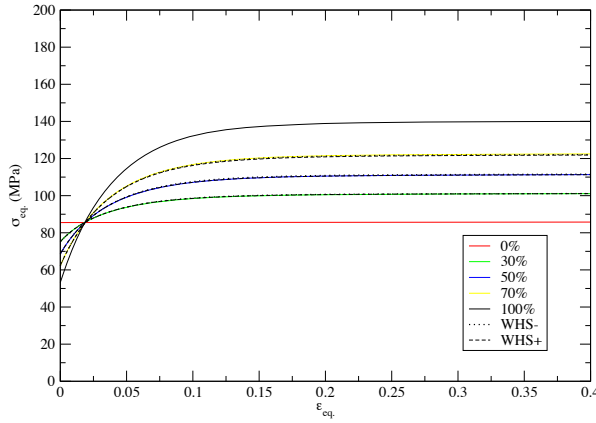
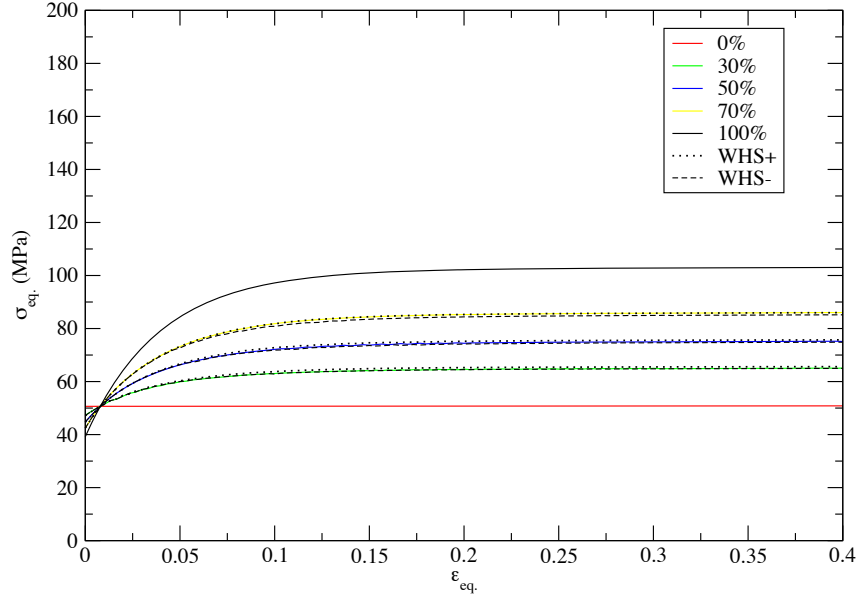


FIG. 6.9: Comparaison des écoulements macroscopiques obtenus à l'aide des modèles à deux transitions d'échelles (pointillés) avec ceux obtenus grâce au modèle auto-cohérent biphasé (traits continus).

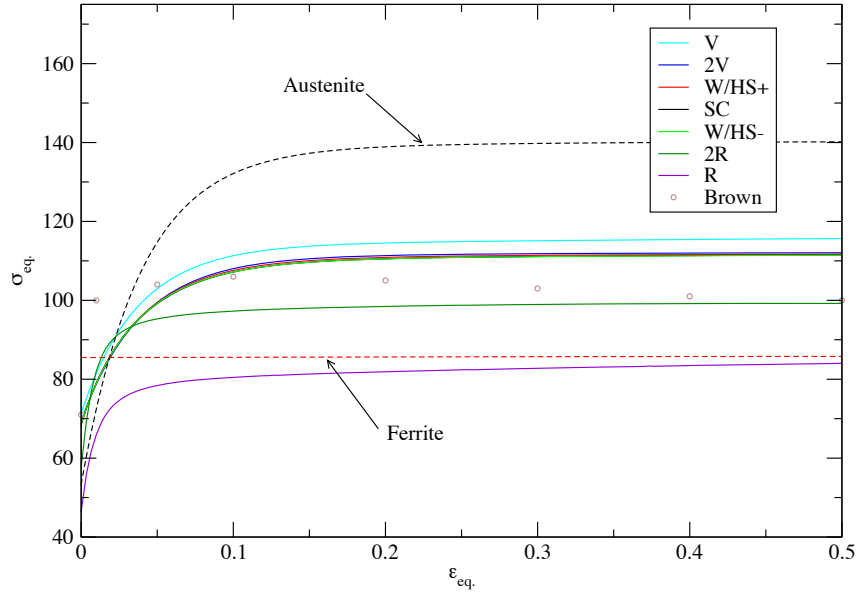
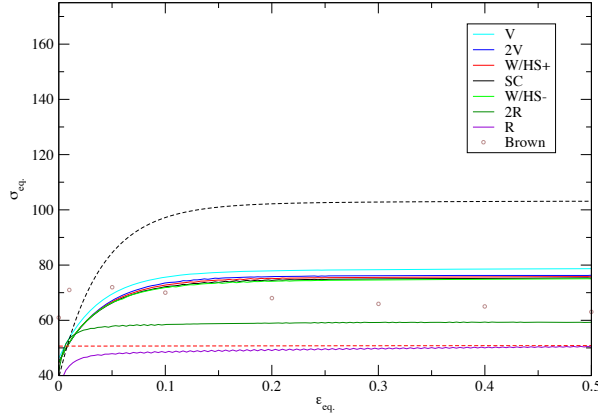
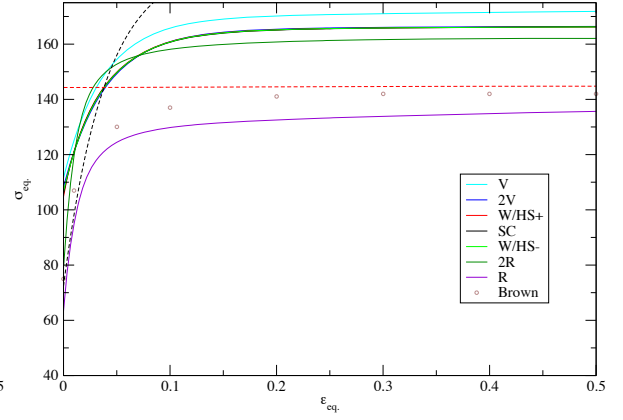
(a) Vitesse de déformation de 1s^{-1} .(b) Vitesse de déformation de 0.1s^{-1} .(c) Vitesse de déformation de 10s^{-1} .

FIG. 6.10: Comparaison des différents modèles, à différentes vitesses, dans le cas d'un mélange en proportion identique des deux phases et en utilisant les paramètres identifiés précédemment sur les données de Brown (celles-ci sont représentées sous la forme de petits cercles pour le matériau E).

6.3.2 Analyse des écoulements locaux

Les dépouillements des micro-grilles, réalisés au chapitre précédent, semblent suggérer un effet de la distribution des phases sur l'écoulement local du matériau. Nous allons utiliser les modèles à notre disposition pour essayer de reproduire cette situation en vue d'analyser le phénomène. Nous chercherons également à tirer des conclusions sur la validité et la pertinence des différentes représentations du matériau.

Notre idée est de nous rapprocher des conditions de sollicitation rencontrées au cours de l'essai, en imposant au modèle une vitesse de déformation déduite de la déformation moyenne mesurée sur la grille. Dans ces conditions, on peut comparer les déformations moyennes par phase mesurées à celles simulées à partir de nos modèles. Cette démarche sera utilisée successivement pour les deux champs de déformation à notre disposition.

6.3.2.a Cas du matériau industriel I

Les déformations moyennes mesurées au cours de l'essai sur le matériau I, déjà données au chapitre précédent, sont reproduites à la table 6.2. Nous rappelons que cette sollicitation est réalisée à 1050°C pour une vitesse de déformation de 1s^{-1} , l'essai en lui-même est un essai de bipoinçonnement et la micro-grille est obtenue à partir de la technique d'insert détaillée au chapitre 5. Les simulations se basent, comme

	ε_{DN}	ε_{DL}	ε_{DT}	$\varepsilon_{\text{DN/DL}}$	$\varepsilon_{\text{eq.}}$
Macroscopique	-17.58	18.93	-1.35	-4.61	21.78
Austénite (avec interface)	-17.38	18.83	-1.45	-4.36	21.60
Austénite (sans interface)	-15.68	17.88	-2.2	-3.55	19.93
Ferrite (avec interface)	-18.84	19.62	-0.78	-5.34	23.06
Ferrite (sans interface)	-17.94	19.07	-1.13	-5.10	22.19

TAB. 6.2: Moyennes des déformations logarithmiques mesurées, à l'aide de la technique de grille, sur le matériau industriel I. Les valeurs sont exprimées en pourcents, les incertitudes sur celles-ci sont globalement de 1% en mesure absolue et de quelques centièmes de pourcent en relatif.

nous l'avons annoncé, sur la déformation macroscopique mesurée qui est présentée à la première ligne de la table 6.2.

Nous allons faire l'hypothèse que le tenseur taux de déformation est constant durant tout l'essai. Les coefficients de ce tenseur, dans la base associée à l'essai de compression plane (DT ; DL ; DN), sont donnés par (6.11).

$$\underline{\underline{\dot{\varepsilon}}}_{\text{simulé}}^I = \begin{pmatrix} -0.06 & 0 & 0 \\ 0 & 0.87 & -0.21 \\ 0 & -0.21 & -0.81 \end{pmatrix} \quad (6.11)$$

Ces valeurs respectent l'incompressibilité du matériau et assurent la valeur unitaire du taux de déformation équivalent¹⁴. Elles permettent, de plus, d'atteindre les valeurs de déformations logarithmiques macroscopiques présentées table 6.2 (150 pas de calcul sont utilisés pour atteindre ce niveau pour un temps simulé de 0.218s). La table 6.3 présente les moyennes par phase associées à la simulation proposée dans le cadre des modèles W/HS± et du modèle auto-cohérent biphasé.

La comparaison des déformations obtenues par la simulation et par l'expérience est synthétisée figure 6.11 et table 6.4. Ce diagramme présente la valeur absolue des deux plus grandes valeurs propres du tenseur des déformations logarithmiques, les données expérimentales sont représentées sous la forme d'un segment qui caractérise l'incertitude sur la mesure de la déformation moyenne par phase¹⁵ ; les points

¹⁴L'asservissement de la machine (§5.2.2) impose à cette grandeur d'être constante au cours de l'essai.

¹⁵L'erreur liée à ces estimations des déformations moyennes par phase est principalement due à l'approximation des domaines de phase à partir de polygones ayant pour sommets les points d'intersection de la grille (voir §5.3.1). Dans le cas de l'austénite, l'estimation sans interface ne fait intervenir que la phase dure et l'estimation avec interface comprend une

		ε_{DN}	ε_{DL}	ε_{DT}	$\varepsilon_{DN/DL}$	$\varepsilon_{eq.}$
Macroscopique	W/HS \pm et SC	-17.67	18.95	-1.31	-4.58	21.83
Austénite	W/HS+	-17.17	18.40	-1.25	-4.45	21.21
	SC	-16.63	17.81	-1.20	-5.52	20.93
	W/HS-	-16.52	17.67	-1.17	-4.27	20.38
Ferrite	W/HS+	-18.16	19.50	-1.36	-4.71	22.46
	SC	-18.61	19.95	-1.36	-3.52	22.69
	W/HS-	-18.82	20.24	-1.44	-4.88	23.29

TAB. 6.3: Moyennes des déformations logarithmiques fournies par les modèles W/HS \pm et SC pour des conditions de sollicitation conduisant aux déformations macroscopiques reportées table 6.2. Les valeurs présentées sont exprimées en pourcents.

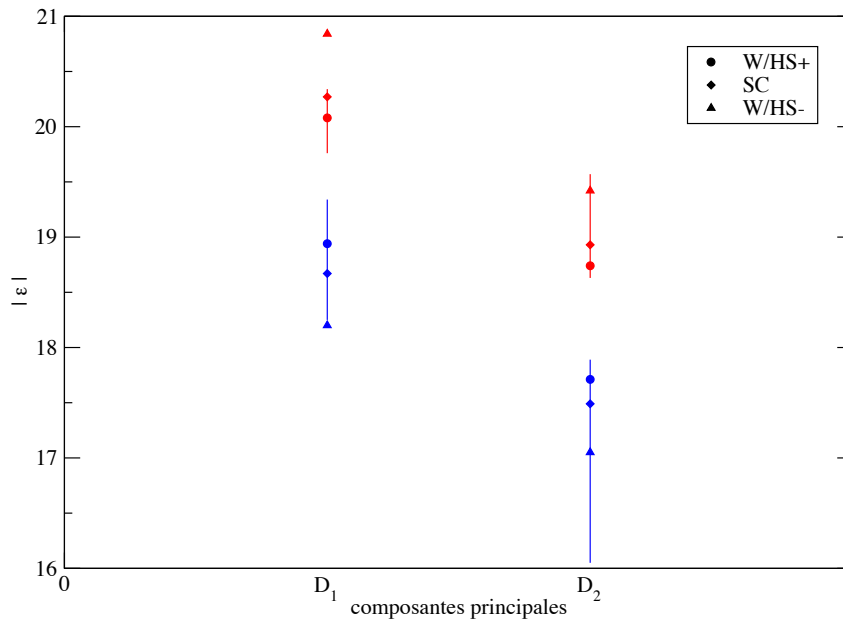


FIG. 6.11: Comparaison des déformations moyennes par phases obtenues expérimentalement et à l'aide des modèles pour le matériau I (D_1 et D_2 sont les valeurs absolues des deux plus grandes valeurs principales, les données relatives à l'austénite et à la ferrite sont présentées respectivement en bleu et en rouge).

	Austénite				Ferrite			
	mesure	W/HS-	SC	W/HS+	mesure	W/HS-	SC	W/HS+
D_1	[18.25 ; 19.34]	18.20	18.67	18.94	[19.76 ; 20.34]	20.84	20.27	20.08
D_2	[16.05 ; 17.85]	17.05	17.49	17.71	[18.67 ; 19.57]	19.42	18.93	18.74

TAB. 6.4: Valeurs principales maximales en valeur absolue dans le cas du matériau I. Ces données sont représentées graphiquement à la figure 6.11.

quant à eux représentent les données issues des modèles. Ce tracé montre que les résultats de la simulation présentent tous une bonne adéquation avec les mesures dans le cas d'un contraste interphase faible. Ainsi dans cette configuration, les modèles sont très peu différents les uns des autres, ce qui vient confirmer les observations du paragraphe précédent. Ce résultat est également visible sur la figure 6.12 décrivant

fraction de phase molle, on peut donc considérer intuitivement que la première doit être plus dure que la seconde, et qu'une meilleure description des domaines de phase devrait fournir des valeurs intermédiaires (le même type de raisonnement s'applique dans le cas de la ferrite).

l'évolution des moyennes par phase suivant les différentes formulations. Il est à noter que l'écoulement macroscopique associé à cet essai est inconnu, il n'est donc pas possible de savoir si l'accord observé avec les données expérimentales à l'échelle locale est également vérifié à l'échelle macroscopique.

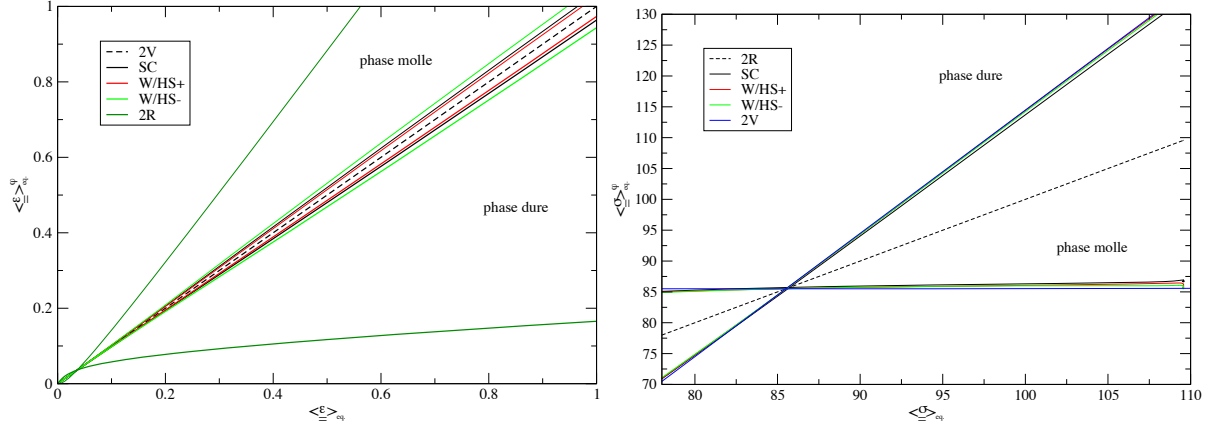


FIG. 6.12: Réponses moyennes par phase pour un polycristal austéno-ferritique (50/50) sollicité à taux de déformation équivalent unitaire et présentant un écrouissage "isotrope" identifié à partir des données de Brown.

Remarque : Absence de relation d'ordre

L'interprétation faite de représentations similaires à celles de la figure 6.11 est à considérer avec précaution. En effet, il n'existe pas de relation d'ordre sur les composantes (même principales) du tenseur des déformations, il est donc ambigu de chercher à montrer que les résultats des calculs sont "compris" dans l'intervalle défini par les mesures expérimentales. La comparaison de ces grandeurs n'est donc que qualitative. Malgré tout, si l'on considère que l'état de déformation dans chacune des phases est une compression plane, on peut définir une relation d'ordre évidente liée à l'expression des tenseurs dans leur repère principal :

$$"\underline{\underline{\epsilon}}_1 \geq \underline{\underline{\epsilon}}_2" \iff \lambda_1 \geq \lambda_2 \quad \text{avec} \quad \underline{\underline{Q}}_i^{-1} \cdot \underline{\underline{\epsilon}}_i \cdot \underline{\underline{Q}}_i = \lambda_i \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix} \quad (6.12)$$

où $\underline{\underline{Q}}_i$ contient les directions propres de la déformation. Nous aurions également pu utiliser l'équivalent de von Mises et on peut vérifier que les conclusions de ce chapitre restent identiques en utilisant ce scalaire.

6.3.2.b Cas du matériau modèle D

Nous allons procéder de la même façon pour analyser le champ lié au matériau modèle D sollicité à la même vitesse que le matériau industriel, mais pour une déformation logarithmique totale de 30% dans la direction normale et une température de 850°C. Les déformations mesurées lors de l'essai sur le matériau D, fournies initialement table 5.4, sont reportées à la table 6.5 Le taux de déformation imposé vérifiant les conditions d'essai est alors donné par (6.13).

$$\dot{\underline{\underline{\epsilon}}}_{\text{simulé}}^D = \begin{pmatrix} -0.16 & 0 & 0 \\ 0 & 0.76 & 0.15 \\ 0 & 0.15 & -0.92 \end{pmatrix} \quad (6.13)$$

Dans un premier temps, nous allons négliger l'influence de la température sur le comportement des phases pures identifié à partir des données de Brown obtenues à 1050°C. Le résultat des simulations réalisées dans ce cas est présenté à la table 6.6. Dans le cas du matériau modèle, l'adéquation entre les prévisions et les mesures expérimentales est moins satisfaisante. En effet, on note (figure 6.13 et table 6.7) pour cette configuration une hétérogénéité interphase plus marquée sur les données expérimentales que sur les résultats des simulations. Ce résultat suggère que la partition des déformations entre les phases est différente de celle observée dans le cas du matériau industriel. Le fait que le modèle W/HS- semble le

	ε_{DN}	ε_{DL}	ε_{DT}	$\varepsilon_{DN/DL}$	$\varepsilon_{eq.}$
Macroscopique	-31.66	26.31	5.35	5.16	34.41
Austénite (avec interface)	-29.80	24.68	5.12	4.84	32.35
Austénite (sans interface)	-26.94	22.43	4.51	4.46	29.31
Ferrite (avec interface)	-34.11	28.20	5.91	5.50	37.01
Ferrite (sans interface)	-35.98	29.87	6.11	5.85	39.09

TAB. 6.5: Moyennes des déformations logarithmiques mesurées, à l'aide d'une technique de grille, sur le matériau modèle D. Les valeurs sont exprimées en pourcents, les incertitudes sur celles-ci sont globalement de 1% en mesure absolue et de quelques centièmes de pourcent en relatif.

		ε_{DN}	ε_{DL}	ε_{DT}	$\varepsilon_{DN/DL}$	$\varepsilon_{eq.}$
Macroscopique	W/HS± et SC	-31.68	26.12	5.51	5.16	34.35
Austénite	W/HS+	-30.46	25.34	5.07	4.99	33.12
	SC	-30.02	24.99	4.99	4.66	32.63
	W/HS-	-28.91	24.31	4.55	4.76	31.54
Ferrite	W/HS+	-32.90	26.90	5.93	5.34	35.57
	SC	-33.29	27.09	6.14	5.83	36.05
	W/HS-	-34.46	27.93	6.46	5.56	37.16

TAB. 6.6: Moyennes des déformations logarithmiques fournies par les modèles W/HS± et SC pour des conditions de sollicitation conduisant aux déformations macroscopiques reportées table 6.5. Les valeurs présentées sont exprimées en pourcents. Dans cette simulation, le comportement est supposé identique à celui identifié à 1050°C.

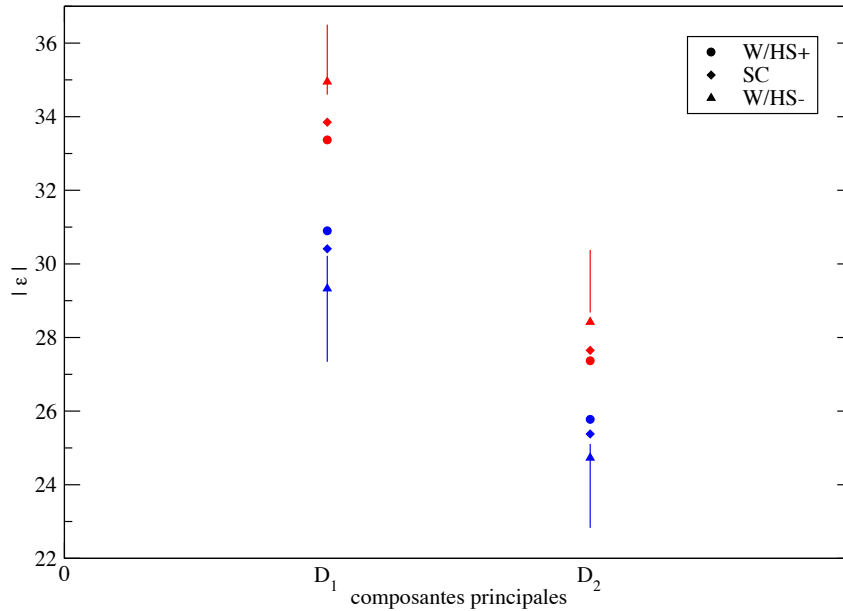


FIG. 6.13: Comparaison des déformations moyennes par phase obtenues expérimentalement et à l'aide des modèles pour le matériau modèle (les données relatives à l'austénite et à la ferrite sont présentées respectivement en bleu et en rouge).

	Austénite				Ferrite			
	mesure	W/HS-	SC	W/HS+	mesure	W/HS-	SC	W/HS+
D_1	[27.34 ; 30.22]	29.33	30.41	30.90	[34.60 ; 36.50]	34.95	33.85	33.37
D_2	[22.83 ; 25.11]	24.73	25.38	25.78	[28.68 ; 30.38]	28.42	27.65	27.37

TAB. 6.7: Valeurs principales maximales en valeur absolue dans le cas du matériau D à 1050°C. Ces données sont représentées graphiquement à la figure 6.13.

plus adapté, associé au rôle particulier que semble jouer la ferrite dans le développement du champ de déformation de la figure 5.47(a), va dans le sens de l'existence d'un effet de la répartition des phases dans le matériau biphasé.

Nous avons considéré, dans cette première approche, que la température n'affectait pas l'écoulement du biphasé ; or les résultats généraux présentés en §1.3.3 montrent que cette hypothèse a peu de chance d'être vérifiée. La relation d'équivalence vitesse-température présentée précédemment nous donne une relation permettant de corriger l'identification faite à 1050°C afin de l'utiliser à 850°C.

Correction du comportement liée à l'effet thermique :

L'idée de cette correction, déjà suggérée par exemple par [83] et [96], repose sur la définition à l'échelle locale d'un paramètre de Zener-Hollomon semblable à celui introduit en (1.1). En supposant que ce paramètre z , avec $z = \dot{\gamma} \exp(Q/RT)$, est lié par une loi puissance à la cission de référence du système considéré, il est possible, connaissant l'énergie d'activation Q et l'exposant viscoplastique n de la phase, d'en déduire l'évolution de la cission de référence avec la température, comme le montre l'équation (6.14).

$$\tau_c(T_2) = \tau_c(T_1) e^{\frac{Q}{nR} \left(\frac{T_1 - T_2}{T_1 T_2} \right)} \quad (6.14)$$

Nous supposons, en outre, que l'énergie d'activation Q intervenant dans cette expression est identique à celle qui peut être mesurée expérimentalement¹⁶ à l'échelle macroscopique. La littérature nous fournit quelques ordres de grandeurs pour ces valeurs. Duprez [51] rapporte qu'en général l'énergie d'activation de la ferrite, Q_α , est comprise entre 270 et 400 kJ.mol⁻¹, alors que celle de l'austénite, Q_γ , varie plutôt entre 390 et 500 kJ.mol⁻¹. Ces ordres de grandeur sont cohérents avec les valeurs proposées par [91] et [181] ($Q_\alpha = 261$ kJ.mol⁻¹ et $Q_\gamma = 410$ kJ.mol⁻¹) et avec celles déterminées par Müller [134] sur des phases quasiment pures appartenant à la famille des alliages modèles développés à l'université de Sheffield et présentés au chapitre 5. Ce dernier trouve $Q_\alpha = 340$ kJ.mol⁻¹ et $Q_\gamma = 400$ kJ.mol⁻¹ pour les deux phases. Nous privilégierons, dans un premier temps, les valeurs préconisées par Müller en raison de la similitude de son matériau et des nuances utilisées ici.

A partir de ces données, nous pouvons déterminer un nouvel ordre de grandeur pour les cissions de référence de chaque phase à 850°C. Afin de tester la pertinence de cette correction nous allons comparer l'adéquation des courbes corrigées issues d'un modèle auto-cohérent biphasé avec un essai de compression axisymétrique réalisé par Hernandez Castillo [74] sur le matériau D à la température de 850°C. On s'aperçoit clairement à la figure 6.14 que les valeurs proposées par Müller surestiment considérablement l'écoulement expérimental, les énergies d'activation qu'il a identifiées ne sont donc certainement pas adaptées à la situation présente. Les énergies d'activation réelles sont certainement moins élevées. On peut remarquer que si l'énergie d'activation de l'austénite est plutôt dans la partie basse de l'intervalle prévu par Duprez [51], ce n'est pas le cas pour la ferrite. On peut donc imaginer que c'est l'énergie de la phase ferritique qui est surestimée. Afin de clarifier ce point, considérons les données de Vernusse [205] présentées en figure 6.15(a) et 6.15(b) et reproduites ici à la figure 6.16 par commodité. Celles-ci sont cohérentes avec les données de Brown pour les phases pures à 1050°C, on peut donc espérer que le même accord sera observé pour une température inférieure. Nous simulons donc un essai de compression plane¹⁷ pour une vitesse de déformation de 1 s⁻¹ afin d'estimer, à partir des données de Vernusse, la cohérence du choix des énergies d'activation. En utilisant les énergies d'activation de Müller cette adéquation est bien avérée dans le cas de l'austénite comme le montre la figure 6.16(a), par contre la contrainte d'écoulement de la phase ferritique est surévaluée (figure 6.16(b)). Une énergie d'activation $Q_\alpha = 200$ kJ.mol⁻¹ semble

¹⁶ Voir les méthodes proposées dans [150] par exemple.

¹⁷ On a vu à la figure 6.14 que peu de différences étaient prévues entre compression plane et compression axisymétrique.

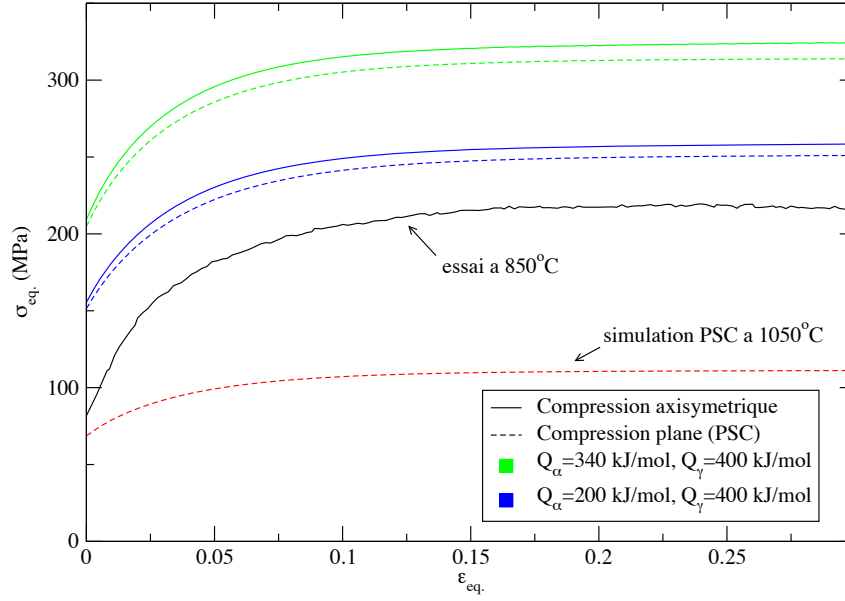


FIG. 6.14: Comparaison des données expérimentales de Hernandez Castillo [74] sur le matériau D obtenues en compression axisymétrique à la température de 850°C et à la vitesse de $1s^{-1}$ avec les simulations auto-cohérentes biphasées à la même température pour différentes énergies d'activation.

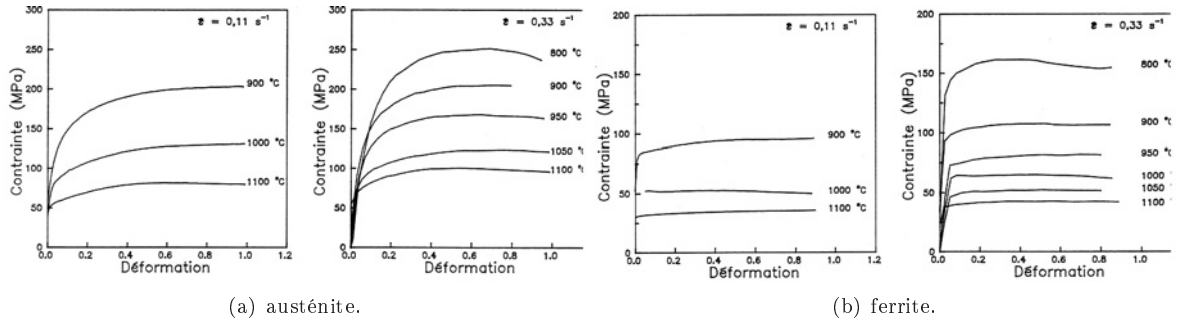


FIG. 6.15: Courbes d'écoulement des phases pures en compression axisymétrique obtenues par Vernusse [205].

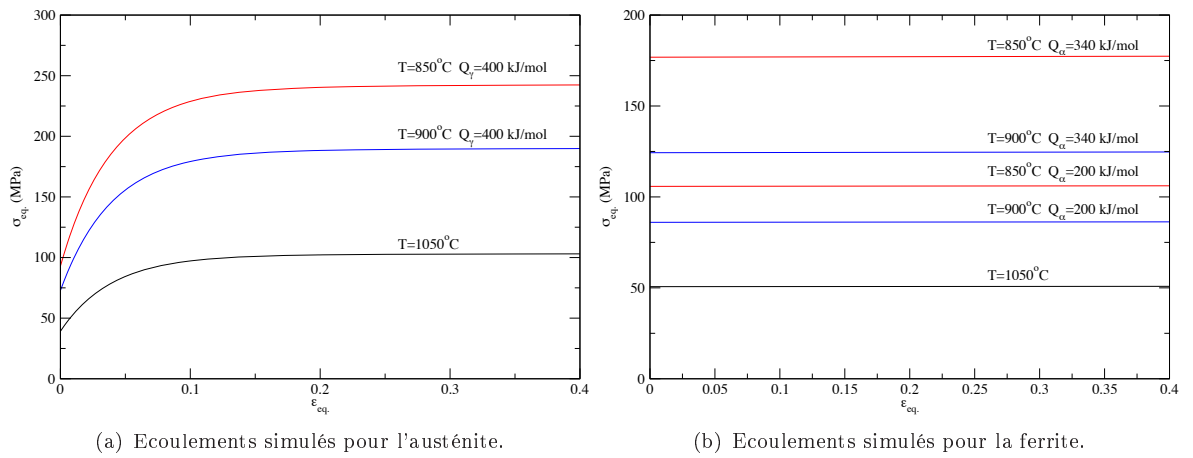


FIG. 6.16: Courbes d'écoulement simulées (modèle auto-cohérent) pour les phases pures sollicitées en compression plane à $0.1s^{-1}$.

plus en accord avec les données de Vernusse et avec l'essai présenté figure 6.14, même si l'écoulement prévu par le modèle auto-cohérent biphasé reste plus raide que celui prévu expérimentalement¹⁸. Dans la suite de ce travail nous considérerons donc $Q_\alpha=200\text{kJ.mol}^{-1}$ et $Q_\gamma=400\text{kJ.mol}^{-1}$, ce qui semble constituer des ordres de grandeur raisonnables au vu de la discussion précédente.

Remarque : Influence des énergies d'activation sur le contraste interphase

La forte incertitude liée à la détermination des énergies d'activation semble, a priori, pouvoir être une source d'erreur assez forte sur les résultats de nos confrontations modèle/expérience. Pour estimer cette erreur on peut tracer le contraste interphase asymptotique en fonction de ces paramètres, c'est-à-dire le rapport $\tau_c^\gamma/\tau_c^\alpha$. On s'aperçoit sur la figure 6.17 que ce facteur évolue très peu dans le domaine de variation proposé par [51]. Les considérations du chapitre 4 ont montré l'importance de ce terme vis-

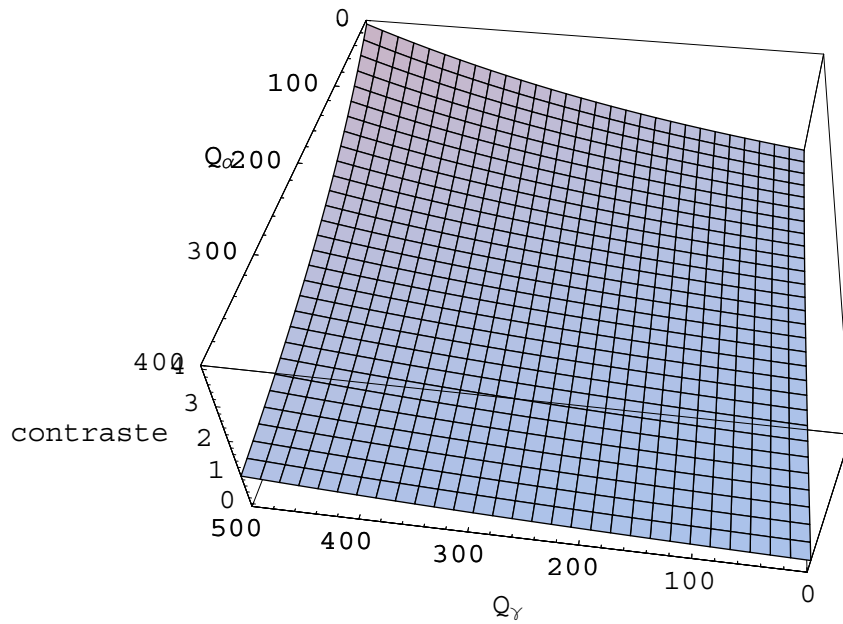


FIG. 6.17: Evolution du contraste interphase asymptotique $\tau_c^\gamma/\tau_c^\alpha$ en fonction des énergies d'activation du matériau.

à-vis de l'influence de la répartition des phases et sur les différences existant entre les modèles. La très faible évolution du contraste suggère que, pour des énergies d'activation évoluant dans ce domaine, peu de différences seront visibles entre les modèles. La figure 6.17 montre également qu'un contraste plus important n'apparaîtrait que pour des valeurs très faibles de Q_α et élevées pour Q_γ .

Comparaison des déformations locales pour des comportements corrigés :

En utilisant la procédure précédente associée cette fois au comportement corrigé, les modèles fournissent les résultats présentés table 6.8. Les déformations moyennes obtenues à cette température présentent une hétérogénéité plus importante entre les modèles (figure 6.18 et table 6.9). Néanmoins, seul le modèle W/HS- semble proposer une hétérogénéité réellement proche de celle observée sur les données expérimentales. Ce résultat est encourageant, car il montre qu'à l'échelle locale il semble exister des situations où la partition des déformations est intermédiaire entre les prévisions faites par les modèles SC et W/HS-. Ce résultat suggère donc qu'un modèle plaçant la ferrite en matrice peut être cohérent avec les mesures obtenues sur un matériau dans lequel des bandes de localisation marquées apparaissent. Malgré cette adéquation, les prévisions des modèles à l'échelle macroscopique restent proches comme le montre la figure 6.19.

¹⁸Ce qui est conforme aux constatations antérieures sur la tendance de ce modèle à prévoir des réponses raides.

		ε_{DN}	ε_{DL}	ε_{DT}	$\varepsilon_{DN/DL}$	$\varepsilon_{eq.}$
Macroscopique	W/HS \pm et SC	-31.68	26.12	5.50	5.16	34.35
Austénite	W/HS+	-30.16	25.10	5.00	4.94	32.79
	SC	-29.47	24.58	4.85	4.62	32.06
	W/HS-	-27.46	23.26	4.15	4.54	30.04
Ferrite	W/HS+	-33.21	27.14	6.01	5.38	35.90
	SC	-33.81	27.48	6.27	5.99	36.62
	W/HS-	-35.90	28.98	6.85	5.78	38.67

TAB. 6.8: Moyennes des déformations logarithmiques fournies par les modèles W/HS et SC pour des conditions de sollicitation conduisant aux déformations macroscopiques reportées table 5.4 pour le matériau D. Les valeurs en pourcents reportées dans cette table se distinguent de celles de la table 6.6 car l'écoulement a été corrigé ici pour tenir compte de l'effet de la température.

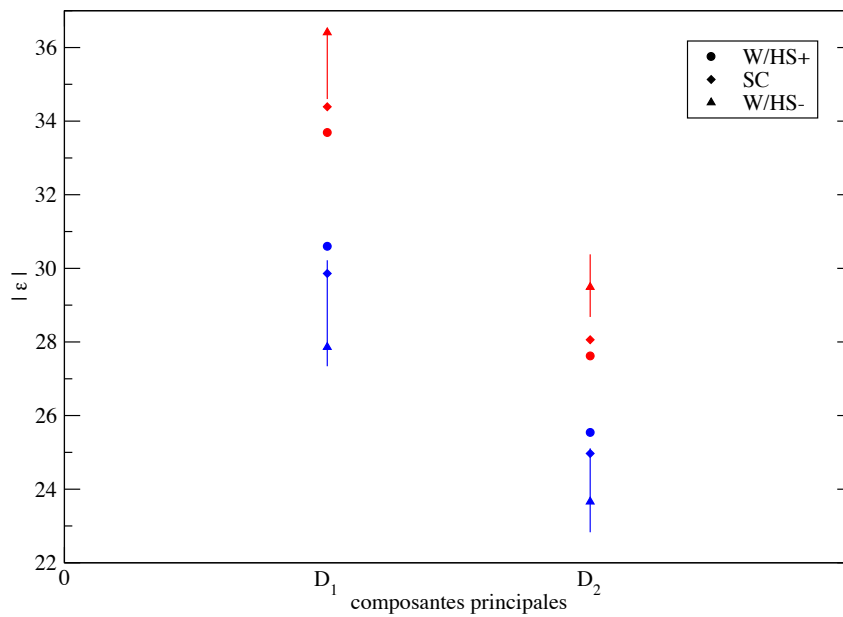


FIG. 6.18: Comparaison des déformations moyennes par phase obtenues expérimentalement et à l'aide des modèles pour le matériau modèle dans le cas d'une correction thermique (les données relatives à l'austénite et à la ferrite sont présentées respectivement en bleu et en rouge).

	Austénite				Ferrite			
	mesure	W/HS-	SC	W/HS+	mesure	W/HS-	SC	W/HS+
D_1	[27.34;30.22]	27.86	29.86	30.60	[34.60;36.50]	36.41	34.39	33.69
D_2	[22.83;25.11]	23.66	24.97	25.54	[28.68;30.38]	29.49	28.06	27.62

TAB. 6.9: Valeurs principales maximales en valeur absolue dans le cas du matériau D à 850°C. Ces données sont représentées graphiquement à la figure 6.18.

6.3.2.c Information statistique d'ordre supérieur

Nous avons comparé jusqu'à présent, dans cette partie, des déformations moyennes fournies par l'expérience et la modélisation. Or, nous avons vu précédemment que la méthode des grilles permettait d'accéder à une description statistique plus riche des champs de déformations. En effet, cette technique permet d'estimer la densité de probabilité de la déformation globalement et au sein de chacune des phases (figure 5.48). Il est naturel de se demander si la modélisation peut nous fournir une information, autre

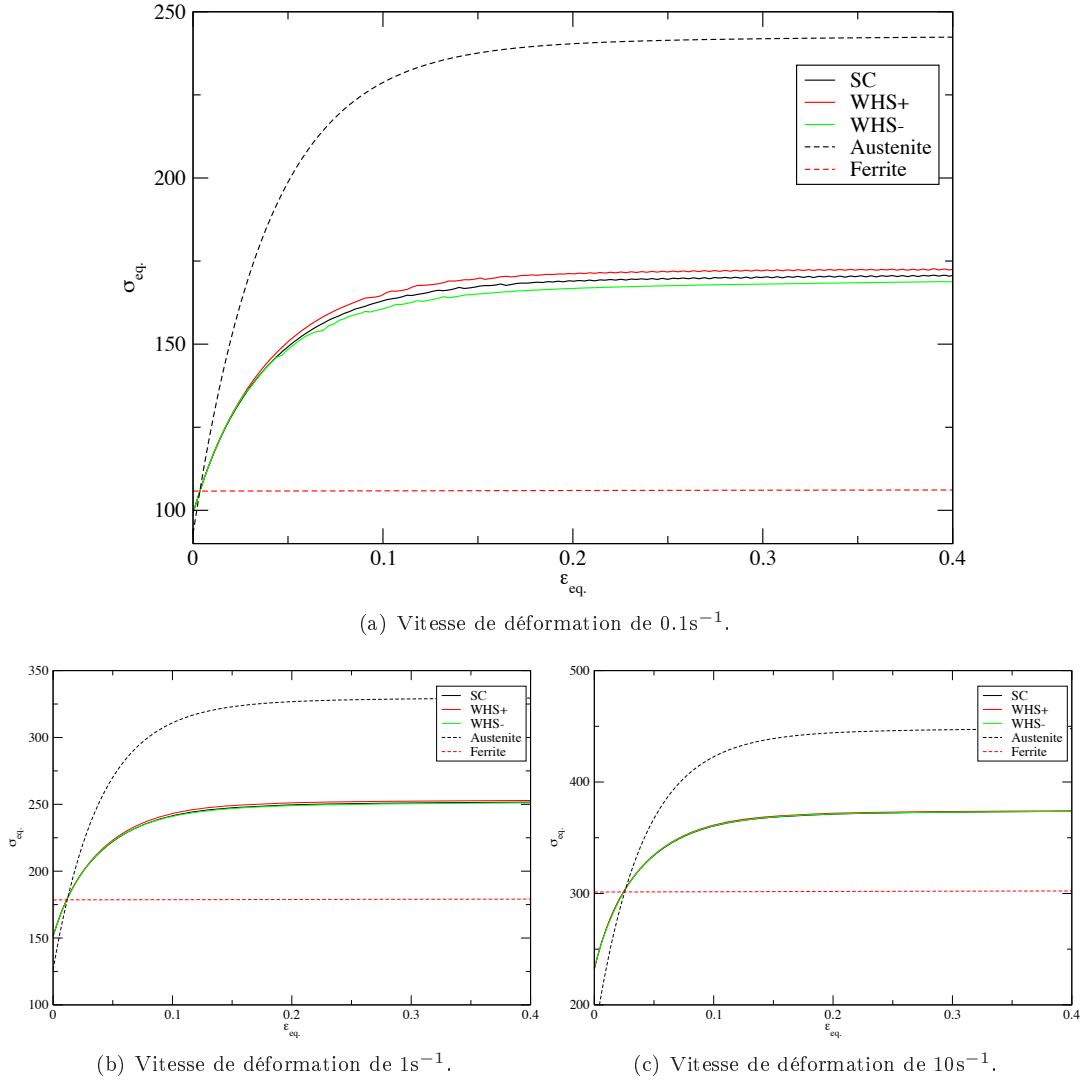


FIG. 6.19: Différences d'écoulement macroscopique entre les différents modèles pour une température de 850°C (pour $Q_\alpha=200\text{kJ.mol}^{-1}$ et $Q_\gamma=400\text{kJ.mol}^{-1}$) et pour trois vitesses différentes. Le matériau considéré sur ces graphes est un biphasé composé d'autant de ferrite que d'austénite.

que la moyenne de la déformation par phase, qui puisse être comparée à cette représentation statistique. La modélisation permet, comme nous l'avons vu en §3.4.2, d'estimer le second moment des contraintes et des vitesses de déformation qui constituent, à travers la définition de l'écart-type, un paramètre caractéristique de "l'étalement" de la densité de probabilité de ces quantités. Il serait donc intéressant de pouvoir comparer l'écart-type, ou la variance, des déformations mesurées expérimentalement avec ces mêmes grandeurs déduites de l'estimation des seconds moments par le modèle. Malheureusement, nous ne connaissons pas actuellement de méthode permettant d'obtenir, par intégration, le second moment des déformations à partir des informations dont nous disposons sur les taux de déformation. Néanmoins, nous pouvons estimer la dispersion des déformations autour de la moyenne pour chaque phase, en considérant l'histogramme des moyennes des déformations pour toutes les familles d'orientations appartenant à la phase considérée. Il est clair que cette hétérogénéité intraphase n'intègre que partiellement les fluctuations de déformation au sein de la phase, car nous négligeons, dans cette description, les fluctuations intra-orientation. L'expression de la variance de la déformation par phase permet de clarifier la simplification proposée. L'équation (4.9c) proposée précédemment dans le cadre des taux de déformation s'applique

également aux déformations à travers (6.15).

$$V_{\varphi}(\underline{\varepsilon}) = \sum_r c_{|\varphi}^r V_r(\underline{\varepsilon}) + \sum_r c_{|\varphi}^r \left[\langle \underline{\varepsilon} \rangle_r \otimes \langle \underline{\varepsilon} \rangle_r - \langle \underline{\varepsilon} \rangle_{\varphi} \otimes \langle \underline{\varepsilon} \rangle_{\varphi} \right] \quad (6.15)$$

Le premier terme du membre de droite de cette expression est celui que nous ne savons pas calculer à partir des données du modèle, le second terme, quant à lui, constitue l'estimation proposée qui ne tient compte que des hétérogénéités des moyennes. Nous n'avons pas de raison de croire que le premier terme pourrait être négligeable, l'estimation proposée ne pourra donc se comparer directement à la densité de probabilité mesurée expérimentalement ; cependant nous pouvons espérer tirer de ces tracés quelques observations qualitatives.

La figure 6.20 présente sur un même graphique la densité de probabilité mesurée et l'estimation théorique pour différents modèles et différentes composantes du tenseur des déformations logarithmiques dans le cas du matériau industriel I. On retrouve sur ces graphiques le peu de différence qui existe entre les modèles

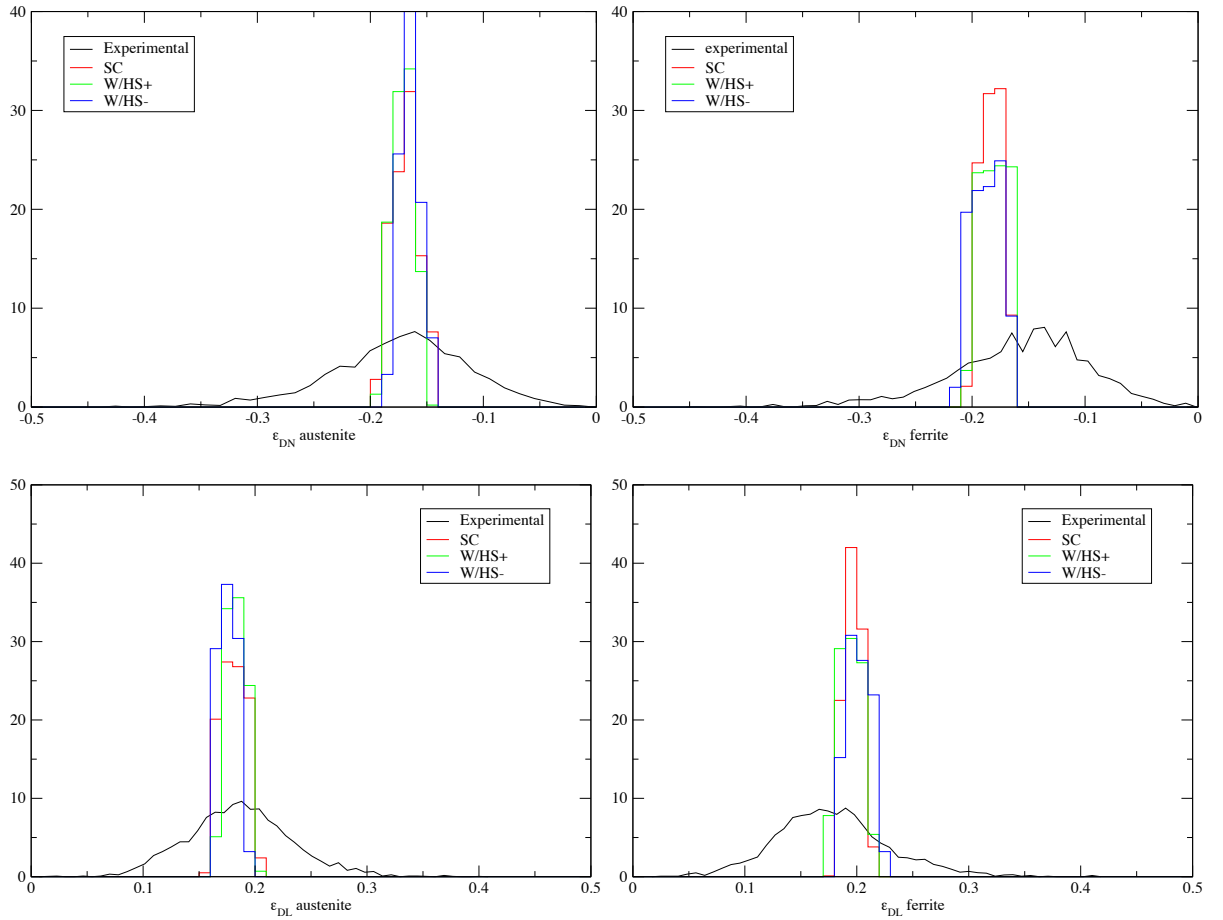


FIG. 6.20: Histogrammes représentant les fluctuations des moyennes des déformations au sein de chaque famille d'orientations pour chaque phase du matériau I. Sur le même graphique est représentée la densité de probabilité estimée expérimentalement (l'aire sous les courbes est unitaire).

dans cette configuration. La largeur des histogrammes est bien plus faible que celle de la densité estimée expérimentalement, ce qui suggère que les fluctuations intra-orientations sont au moins aussi importantes que l'hétérogénéité des moyennes interphases. Il serait donc souhaitable que le modèle prévoie des fluctuations au sein de chaque famille d'orientations qui soient de cet ordre de grandeur.

Si l'on suppose que le rapport fluctuation intra-orientation/hétérogénéité intraphase, noté f , se conserve lorsque l'on passe des taux de déformation aux déformations, on peut estimer la contribution des fluctuations en se basant sur la figure 6.21 tracée pour l'état final prévu par la simulation. Le rapport de

la largeur en abscisse du nuage de points¹⁹ sur son ordonnée nous donne un ordre de grandeur pour ce rapport, néanmoins l'estimation de ce paramètre est réalisée à partir de l'expression suivante

$$f^2 = \frac{\mathbb{K} :: \sum_r c_{|\varphi}^{(r)} \left(\langle \underline{\varepsilon} \otimes \underline{\varepsilon} \rangle_r - \langle \underline{\varepsilon} \rangle_r \otimes \langle \underline{\varepsilon} \rangle_r \right)}{\mathbb{K} :: \sum_r c_{|\varphi}^{(r)} \left(\langle \underline{\varepsilon} \rangle_r \otimes \langle \underline{\varepsilon} \rangle_r \right) - \langle \underline{\varepsilon} \rangle_{\varphi} \otimes \langle \underline{\varepsilon} \rangle_{\varphi}} = \frac{a^2}{b^2} \quad (6.16)$$

où a et b représentent respectivement l'écart-type intra-orientation et interphase des moyennes des déformations. On obtient ainsi les résultats de la table 6.10 qui mettent en évidence l'importance des fluctuations intra-orientation par rapport aux hétérogénéités intraphases des moyennes. Ces résultats

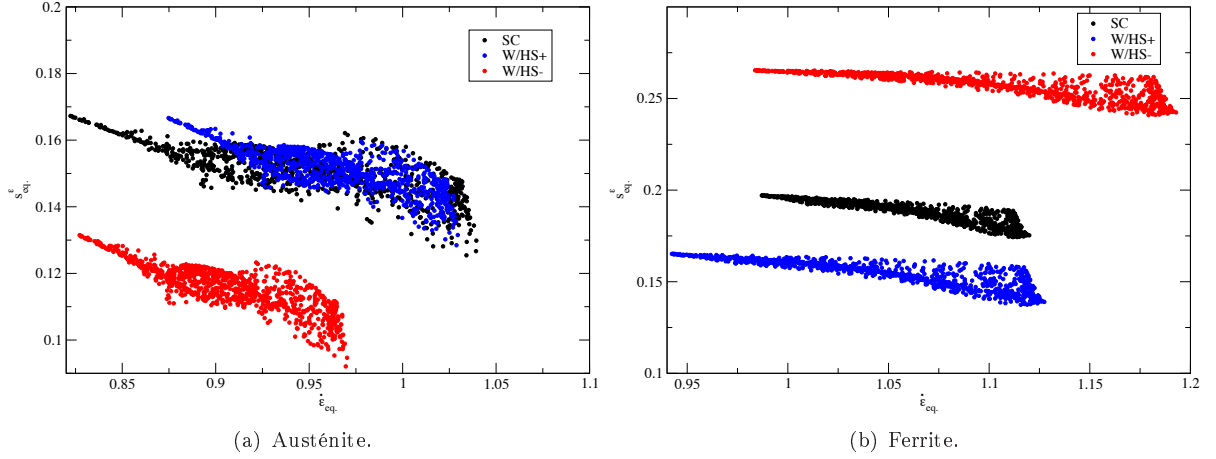


FIG. 6.21: Représentation des fluctuations au sein des phases dans le cas du matériau industriel. Ce type de graphique a déjà été considéré au chapitre 4.

		W/HS-	SC	W/HS+
a^2	Austénite	0.013	0.023	0.023
	Ferrite	0.066	0.035	0.024
b^2	Austénite	0.006	0.014	0.006
	Ferrite	0.016	0.006	0.012
f^2	Austénite	2.11	1.58	3.66
	Ferrite	4.04	5.67	1.97

TAB. 6.10: Variances intra- et inter-orientation (a^2 et b^2) et rapport fluctuation intra-orientation/hétérogénéité intraphase (f^2) pour différents modèles dans chaque phase du matériau industriel I.

montrent bien l'importance des fluctuations intra-orientations prévues par les modèles²⁰.

On peut, de même, tracer ces figures dans le cas du matériau modèle D, en utilisant les corrections thermiques introduites précédemment. Les modèles donnent alors des résultats légèrement distincts (figure 6.22). Si l'on considère les ratio f identifiés sur les données simulées de la figure 6.23 et reportés table 6.11, on peut estimer, qualitativement, à partir des histogrammes de la figure 6.22 et, plus quantitativement, à partir du tableau 6.12 présentant les écarts-types (6.17) des champs de déformations, l'adéquation entre

¹⁹Nous considérons ici des graphiques similaires à ceux utilisés au chapitre 4, des tracés en composantes seraient, sans doute, plus adaptés dans le cas présent mais, souhaitant uniquement illustrer une tendance, nous nous contenterons des grandeurs équivalentes au sens de von Mises.

²⁰Le calcul de b^2 ne se base pas exactement sur l'écart-type des abscisses des nuages de points de la figure 6.21, en effet l'équivalent de la moyenne par phase n'est pas exactement la moyenne par phase des équivalents. Si b était néanmoins assimilée à la variance des abscisses nous obtiendrions des valeurs inférieures pour ce paramètre ce qui conduirait à des f plus importants.

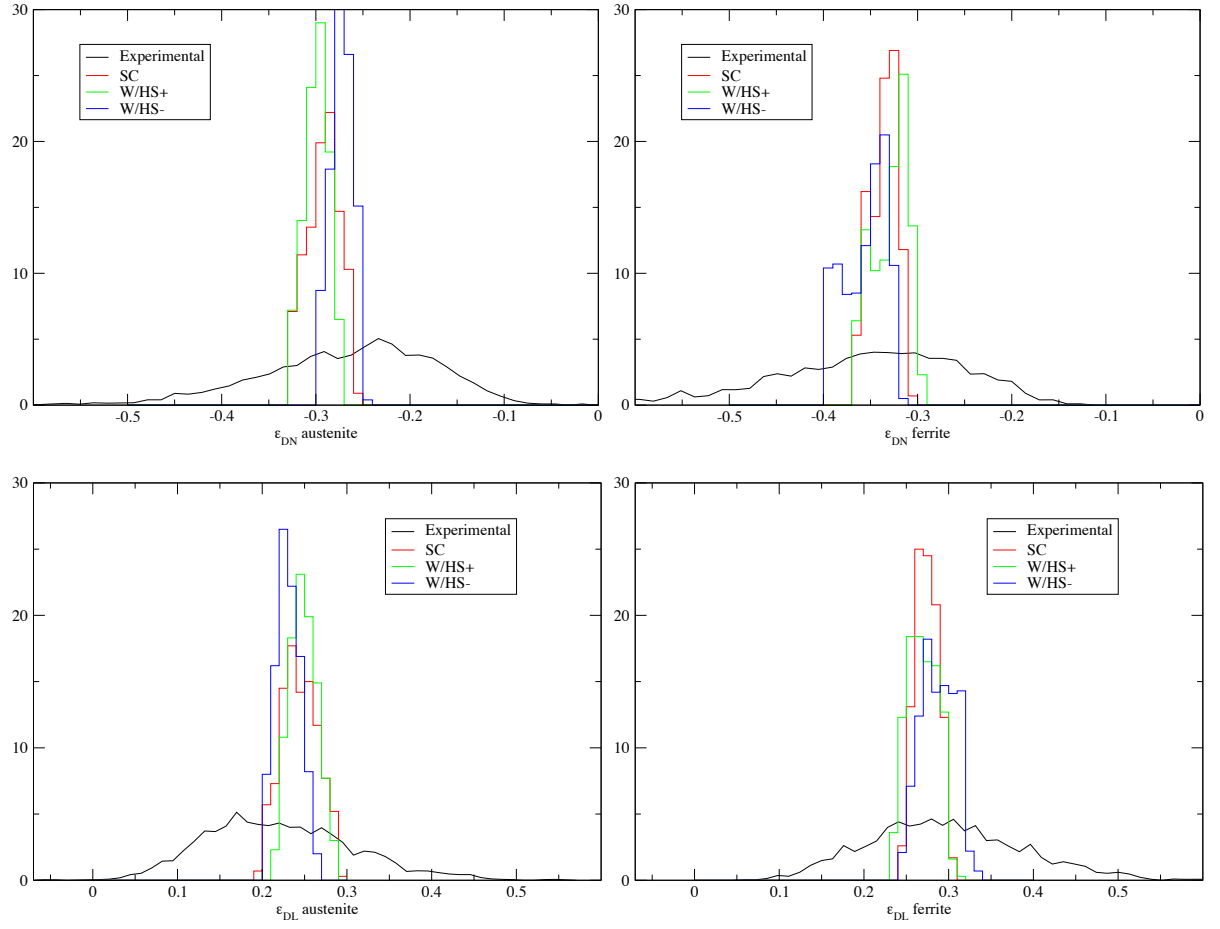


FIG. 6.22: Représentation des fluctuations des moyennes des déformations au sein de chaque famille d'orientations pour chaque phase dans le matériau modèle D. Sur le même graphique est représentée la densité de probabilité estimée expérimentalement (l'aire sous les courbes est unitaire).

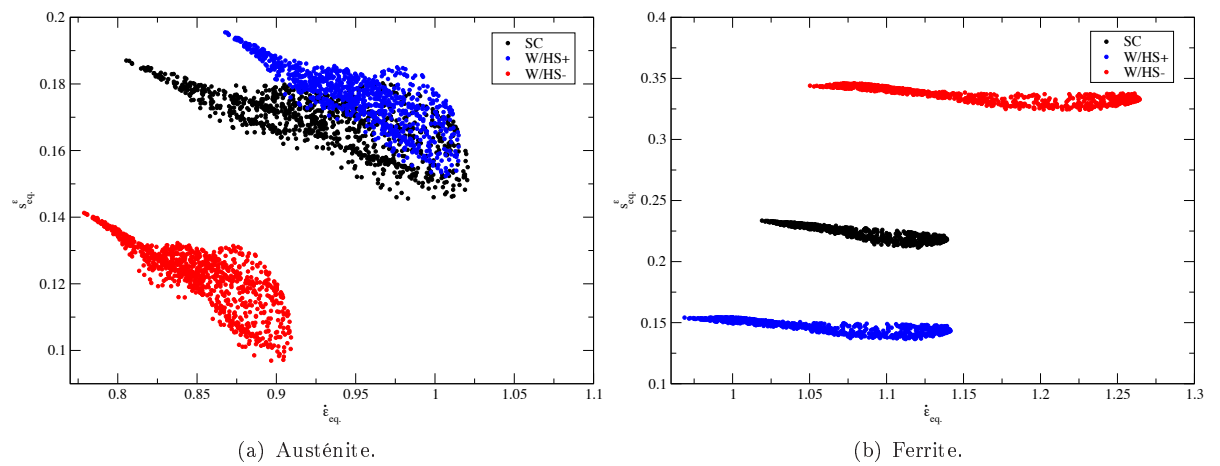


FIG. 6.23: Représentation des fluctuations au sein des phases dans le cas du matériau modèle. Ce type de graphique a déjà été considéré au chapitre 4.

		W/HS-	SC	W/HS+
a^2	Austénite	0.015	0.028	0.031
	Ferrite	0.113	0.050	0.022
b^2	Austénite	0.007	0.018	0.008
	Ferrite	0.018	0.005	0.011
f^2	Austénite	2.20	1.58	3.66
	Ferrite	6.15	9.72	1.90

TAB. 6.11: Variances intra- et inter-orientation (a^2 et b^2) et rapport fluctuation intra-orientation/hétérogénéité intraphase (f^2) pour différents modèles dans chaque phase du matériau modèle D .

les fluctuations mesurées et les fluctuations simulées.

$$\rho_{ij} \approx \sqrt{(f^2 + 1) \sum_r c_{|\varphi}^r \left[\langle \underline{\varepsilon} \rangle_r \otimes \langle \underline{\varepsilon} \rangle_r - \langle \underline{\varepsilon} \rangle_\varphi \otimes \langle \underline{\varepsilon} \rangle_\varphi \right]_{ij}} \quad (6.17)$$

Il semble que, quel que soit le modèle, ces fluctuations soient sous-estimées par rapport aux résultats des mesures de champ.

Après nous être intéressés à l'écoulement du matériau aux différentes échelles, nous pouvons comparer

écart-type (%)	Austénite DN	Austénite DL	Ferrite DN	Ferrite DL
Mesuré	9.29	8.74	10.63	9.18
Estimé SC	2.75	3.48	4.59	4.27
Estimé W/HS+	2.77	3.47	3.16	2.95
Estimé W/HS-	2.05	2.55	6.00	5.37

TAB. 6.12: Calcul des écarts-types (racine carrée de la variance) dans chaque phase du matériau modèle D . Dans le cas des modèles ces quantités sont estimées à partir d'une hypothèse partant des données des figures 6.22 et 6.23.

qualitativement les évolutions microstructurales simulées à celles obtenues expérimentalement.

6.3.3 Prédiction de l'évolution morphologique

Le chapitre 5 a présenté quelques résultats en termes d'évolution de texture et de fonctions de corrélation des phases. Afin de compléter notre comparaison modèle/expérience, nous allons nous intéresser aux prévisions du modèle concernant ces aspects.

6.3.3.a Prédiction de textures

Nous avons souhaité simuler les textures présentées initialement à la figure 5.29 (et reproduites ici aux figures 6.24(a) et 6.24(b) par commodité). Ces résultats sont obtenus pour un matériau sollicité à la vitesse de $0.7s^{-1}$, pour une température de $850^\circ C$ et pour une déformation logarithmique de 0.36 dans la direction de compression. La figure 6.24 présente les projections stéréographiques associées aux textures prévues par les différents modèles pour ces conditions (la correction thermique étant réalisée comme précédemment). Les textures obtenues à l'aide des modèles 2V, W/HS \pm et SC sont difficiles à distinguer, ce qui correspond aux observations précédentes concernant les écoulements macroscopiques. Les prévisions de ces modèles donnent un assez bon accord vis-à-vis des résultats expérimentaux, aussi bien en termes de forme des figures de pôles qu'en termes d'intensité des densités. Il semble néanmoins que la texture de la phase ferritique soit légèrement plus marquée expérimentalement. Le modèle 2R, quant à lui, prévoit un développement trop important de la texture de la phase ferritique et sous-estime fortement la réorientation des cristaux de la phase austénitique ce qui n'est pas compatible avec l'expérience.

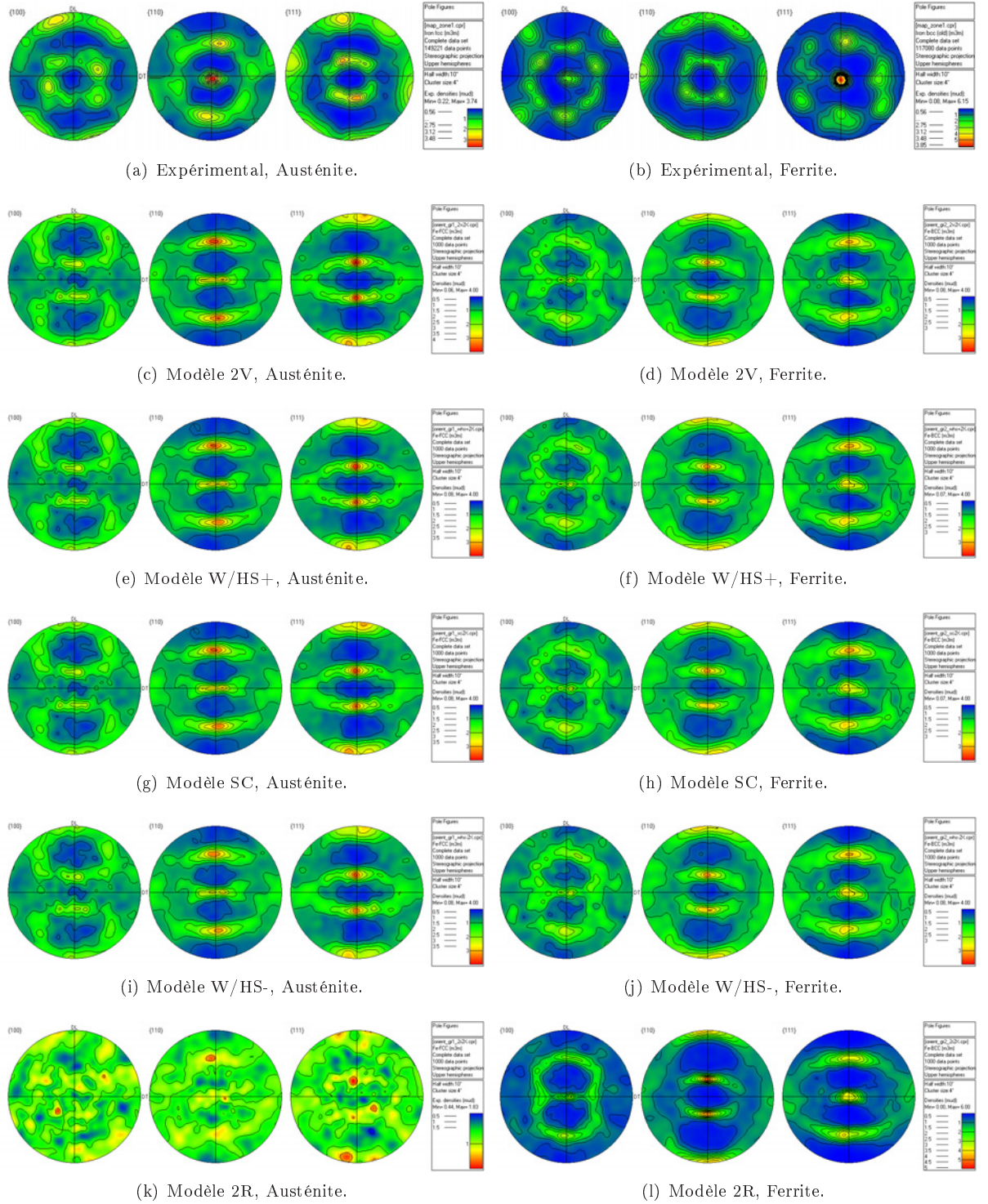


FIG. 6.24: Textures obtenues à l'aide des différents modèles utilisés pour un niveau de déformation logarithmique de 0.36 à une température de 850°C et une vitesse de déformation équivalente de $0.7s^{-1}$. La première ligne reproduit les textures expérimentales obtenues au chapitre 5 sur le matériau G sollicité dans ces conditions.

6.3.3.b Symétrie de répartition des phases

Concernant l'évolution morphologique du matériau, on peut s'intéresser également à l'évolution du (ou des) tenseur(s) microstructural(aux). Nous ne considérerons ici, pour simplifier, que l'évolution de la

symétrie de distribution des phases. Concernant ce paramètre, l'adéquation avec les mesures expérimentales est nécessairement bonne. En effet, nous avons vu au chapitre 5 que les isovaleurs de la fonction d'auto-corrélation de l'austénite présentaient une forme proche de celle d'une ellipse et que l'évolution du rapport de forme de ces isovaleurs respectait le rapport de réduction imposé au matériau. Le pilotage de la simulation en taux de déformation imposé et le mode de mise à jour du tenseur microstructural relatif aux phases, conduisent celui-ci à respecter également les rapports de réduction imposés au matériau.

Il est néanmoins à noter que, pour toutes les simulations rapportées ici, nous avons considéré que la symétrie de répartition initiale des phases était isotrope, c'est-à-dire que le tenseur microstructural est initialement sphérique. Il serait bon d'estimer dans la suite l'influence de cette hypothèse sur l'écoulement prévu par le modèle.

Avant de clore ce chapitre, la non coïncidence des prévisions théoriques et des mesures expérimentales, concernant les écoulements macroscopiques obtenues par Brown et les hétérogénéités locales sous-estimées, nous incite à considérer l'effet de paramètres fixés de façon un peu arbitraire dans notre approche, afin de tester leur influence sur la prévision de l'écoulement macroscopique.

6.4 Influence de la texture ou de la microstructure initiale

Nous nous concentrerons, ici, sur une estimation de l'influence de la texture initiale et de la symétrie du tenseur microstructural initial. Nous ne cherchons pas, dans cette section, à être exhaustif, mais nous souhaitons déterminer si ces facteurs seraient susceptibles d'expliquer l'aspect des écoulements biphasés obtenus par Brown [27] ou les croisements présentés aux figures 1.18 et 1.19, comme cela a été suggéré par certains auteurs [4].

Influence de la texture initiale :

Afin d'estimer l'effet de la texture initiale, nous avons repris la simulation auto-cohérente biphasée réalisée à 1050°C pour une vitesse de déformation unitaire. Mais nous avons considéré, cette fois, des textures initiales qui pouvaient être non isotropes. Deux cas ont été envisagés à titre d'illustration : une situation où l'une des phases présente une texture de laminage similaire à celle qui apparaît naturellement au cours de l'essai, et une situation où l'une des phases présente une texture de laminage orientée à 90° par rapport à la direction de sollicitation. Ce dernier cas pourrait correspondre à la situation expérimentale, dans le cas où le recuit aurait été insuffisant. En effet, le matériau utilisé par Brown est laminé puis recuit avant d'être sollicité dans une direction orthogonale à la direction du laminage. Les écoulements obtenus sont présentés figure 6.25 pour le premier cas et figure 6.26 pour le second. L'influence de la texture initiale semble très limitée, dans le cadre de cette modélisation, et peut, de ce fait, difficilement expliquer les résultats antérieurs. Bien que les modèles W/HS± ne soient pas représentés ici, ceux-ci donnent pour ces tests des résultats proches de ceux du modèle auto-cohérent biphasé.

Influence de la morphologie initiale de la répartition des phases :

De même, nous allons considérer trois tenseurs microstructuraux $\underline{\underline{Z}}$ différents pour représenter la symétrie de distribution initiale des phases. Trois configurations anisotropes sont utilisées ici (figure 6.27), partant toujours de la situation de référence à 1050°C pour une vitesse de déformation logarithmique équivalente de $1s^{-1}$. Nous considérons tout d'abord une anisotropie liée à l'allongement des phases suivant la direction transverse²¹, ($Z_{11} = 0.1$, $Z_{22} = 1$, $Z_{33} = 1$), puis nous considérerons des anisotropies dans le plan de la sollicitation avec ($Z_{11} = 1$, $Z_{22} = 0.5$, $Z_{33} = 2$) et ($Z_{11} = 1$, $Z_{22} = 2$, $Z_{33} = 0.5$). La figure 6.27 nous apprend que pour ces rapports de forme, beaucoup plus importants que ceux mesurés expérimentalement, l'effet sur la courbe d'écoulement macroscopique reste assez faible. On s'aperçoit en particulier : que l'allongement dans la direction transverse adoucit très légèrement l'écoulement, que le cas d'un aplatissement dans la direction normale (situation proche des observations expérimentales) conduit à un léger durcissement²² et que l'allongement dans la direction normale (configuration peu en accord avec les observations faites sur la microstructure) conduit à l'adoucissement le plus marqué.

Les modélisations précédentes montrent que la texture initiale et la forme de la symétrie de répartition

²¹Rappelons ici que les valeurs principales de $\underline{\underline{Z}}$ correspondent, comme on l'a vu en §3.5.2 aux inverses des demi-axes de l'ellipsoïde.

²²Ce résultat est cohérent avec l'observation du §4.2.3.

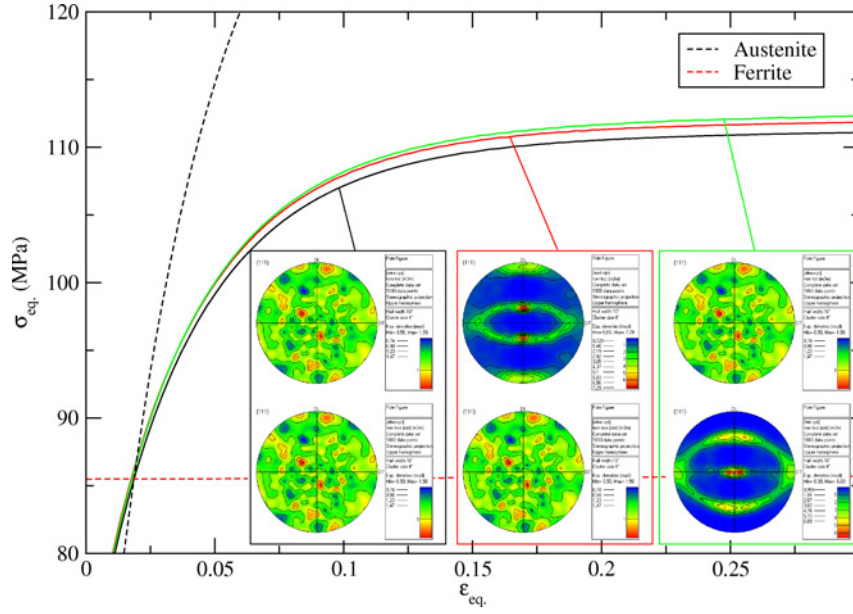


FIG. 6.25: *Ecoulements macroscopiques obtenus, à l'aide du modèle auto-cohérent biphasé, en présence d'une texture de laminage initiale similaire à celle apparaissant au cours de la sollicitation.*

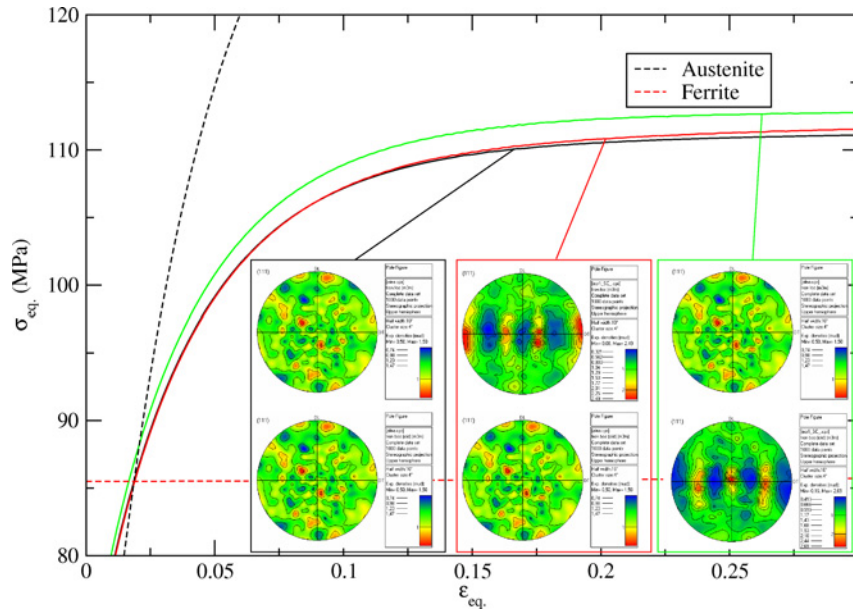


FIG. 6.26: *Ecoulements macroscopiques obtenus, à l'aide du modèle auto-cohérent biphasé, pour une texture initiale "orthogonale" à celle apparaissant lors de la sollicitation.*

des phases jouent un rôle assez marginal dans le cadre des conditions d'essai utilisées par Brown. L'hypothèse d'Al-Jouni [4] consistant à justifier les croisements qu'il observe (figure 1.19) par un effet de texture semble donc assez peu crédible. De même, la forme des données de Brown, sur les matériaux biphasés, ne semble pas pouvoir être expliquée à l'aide de ces paramètres.

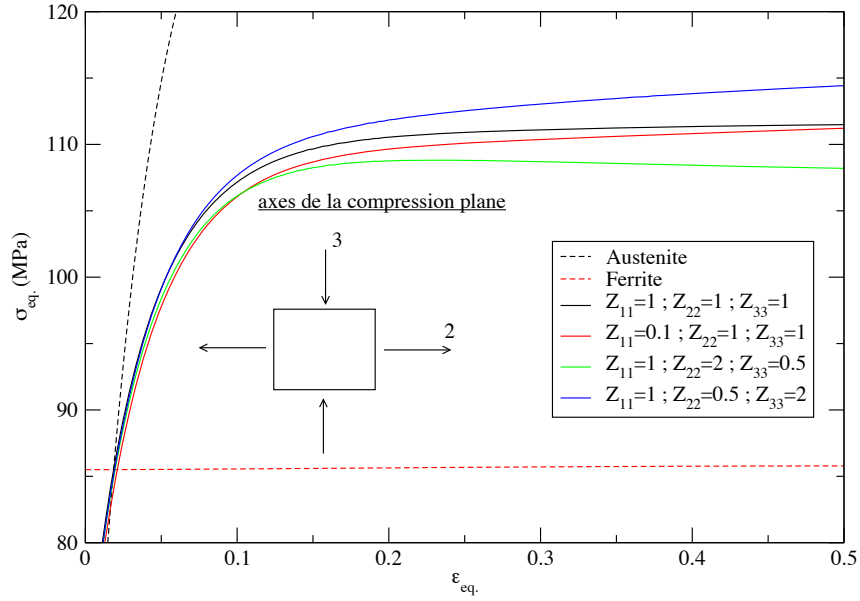


FIG. 6.27: Influence du tenseur microstructural initial sur l'écoulement.

6.5 Influence de l'écrouissage et du contraste interphase

Nous avons considéré, pour simplifier, un écrouissage isotrope du matériau. Cette approche est sans doute trop simpliste dans la plupart des cas. Sans nous intéresser en détail à l'influence de l'écrouissage sur la prévision du comportement, nous souhaitons vérifier deux points. Il s'agit dans un premier temps de montrer que notre hypothèse d'isotropie ne nous a pas conduit à une formulation particulière ayant pour effet de masquer l'influence de la répartition des phases. Et dans un second temps, nous souhaitons vérifier que, dans le cas d'un matériau présentant un contraste plus important, nous pouvons avoir un effet marqué de la répartition des phases. Cette dernière vérification vise à montrer que l'absence de différences entre les modèles est bien due à un contraste interphase trop faible et non à un autre effet lié à l'implémentation de l'écrouissage.

Résultats pour d'autres formes d'écrouissage :

Nous considérons dans cette section quelques exemples simples de lois d'écrouissage, différentes de celle utilisée dans tout le reste du chapitre, afin de vérifier que, dans ces conditions, il n'y a pas un effet manifeste de la répartition des phases.

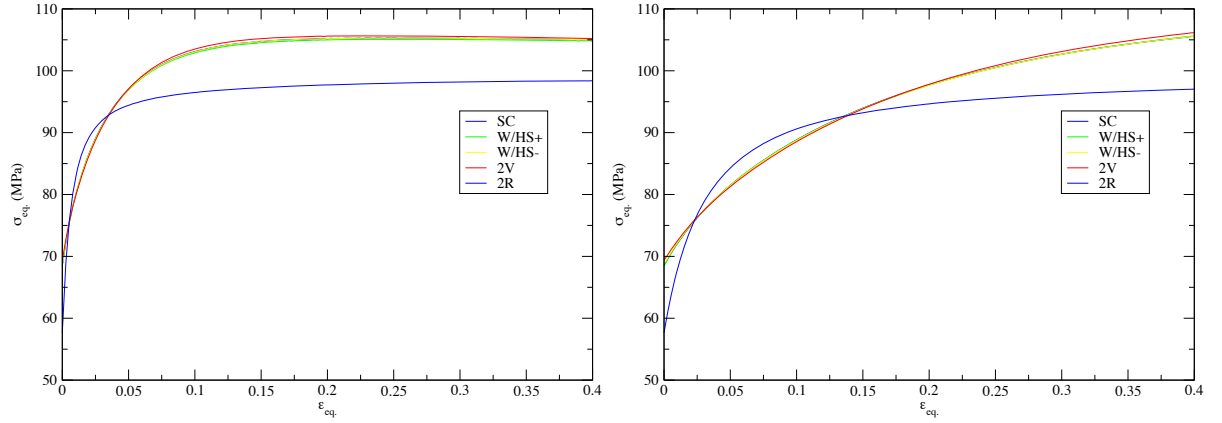
Nous avons choisi de considérer une situation d'auto-écrouissage ($h_{kk'} = \delta_{kk'}$) afin de nous démarquer sensiblement de la situation d'écrouissage isotrope où le modèle anisotrope classique et le modèle reformulé sont équivalents. Une réidentification rapide des paramètres conduit aux résultats présentés figure 6.28. On remarque sur ces graphes que les modèles W/HS± sont toujours très proches du modèle auto-cohérent biphasé. L'effet de la répartition des phases ne se révèle pas en changeant la loi d'écrouissage. La forme de la figure 6.28(b) suggère qu'un paramètre θ_0 plus important est nécessaire pour mieux modéliser les données dans le cadre de cet écrouissage. Il est à noter que, dans le cas du modèle anisotrope, τ_1 et θ_0 ont dû être réidentifiés, alors que pour le modèle reformulé seul θ_0 nécessite une réidentification, cette simplification a été expliquée à la fin du §6.1.

Ainsi, il semble que la forme isotrope classique de la loi d'écrouissage ne soit pas responsable de la similarité des réponses lors de l'utilisation des différents modèles.

De plus, dans le cas d'un écrouissage isotrope, se baser sur la moyenne des taux de glissement, ou sur la racine de la moyenne du carré des taux de glissement (modèle basé sur les seconds moments), ne durcit quasiment pas l'écoulement comme le montre la figure 6.29.

Simulation pour un contraste fictif :

Afin de se convaincre que l'absence d'effet dû à la répartition des phases est bien liée à un contraste



(a) Ecouissage anisotrope ($\tau_0 = 20, \tau_1 = 150, \theta_0 = 1200, \theta_1 = 0$). (b) Ecouissage reformulé ($\tau_0 = 20, \tau_1 = 33, \theta_0 = 1200, \theta_1 = 0$).

FIG. 6.28: Ecoulements macroscopiques obtenus pour différents écouissages pour une sollicitation à vitesse unitaire.

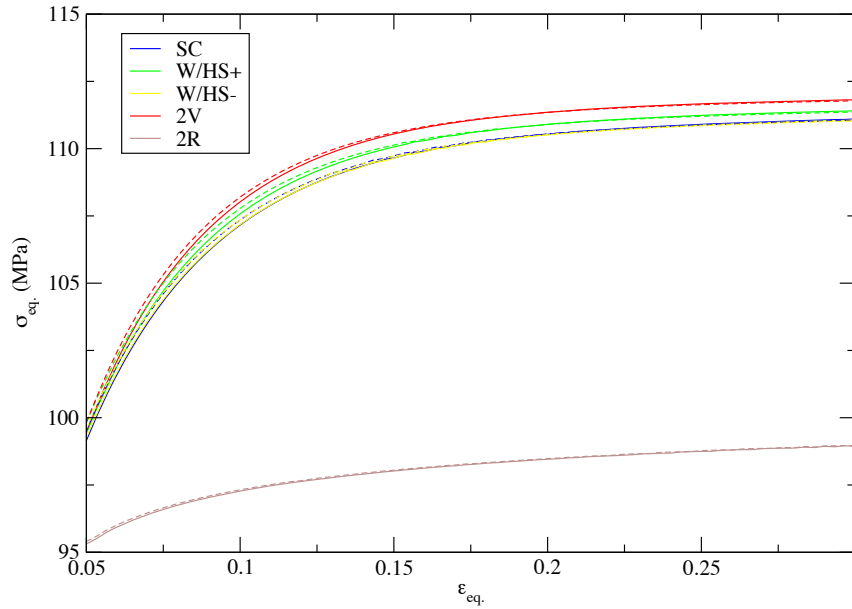


FIG. 6.29: Différences de réponse obtenue dans le cas d'un écouissage isotrope basé sur la moyenne du taux de glissement (traits pleins) ou sur les seconds moments du taux de glissement (traits interrompus).

interphase trop faible et non à une spécificité de l'implémentation en présence d'écrouissage, le cas d'un contraste fictif est considéré. La figure 6.30 présente le résultat des simulations pour différentes fractions volumiques et les paramètres d'écrouissage (dans le cas d'une loi isotrope) présentés à la table 6.13. Ces valeurs prévoient un contraste de l'ordre de 5.6 entre les cissions de référence des deux phases à la saturation²³. On remarque sur cette figure que les modèles W/HS \pm prévoient des différences d'écoulement importantes à partir d'une déformation de 10%. On notera en particulier la forme spécifique de la courbe W/HS- qui présente une saturation très différente de celle de W/HS+, de SC ou encore de 2V. Ainsi, l'effet déjà visible à la figure 4.20 semble amplifié par la présence d'un écouissage intracrystallin.

De plus, la figure 6.31 montre que les domaines compris entre les courbes W/HS- et W/HS+, pour différentes fractions volumiques, peuvent s'intersecter. Nous pouvons donc imaginer des croisements entre courbes de fractions volumiques différentes du fait d'une répartition des phases différentes. L'hypothèse de

²³ c'est-à-dire pour $\tau_c(\Gamma = \infty) = \tau_0 + \tau_1$.

phase pure	n	τ_0 (MPa)	τ_1 (MPa)	θ_0 (MPa)	θ_1 (MPa)
γ	7.5	20	200	300	0
α	4.4	39	0	0	0

TABLE 6.13: Valeurs fictives des paramètres d'écrouissage utilisés pour la modélisation d'un cas à fort contraste.

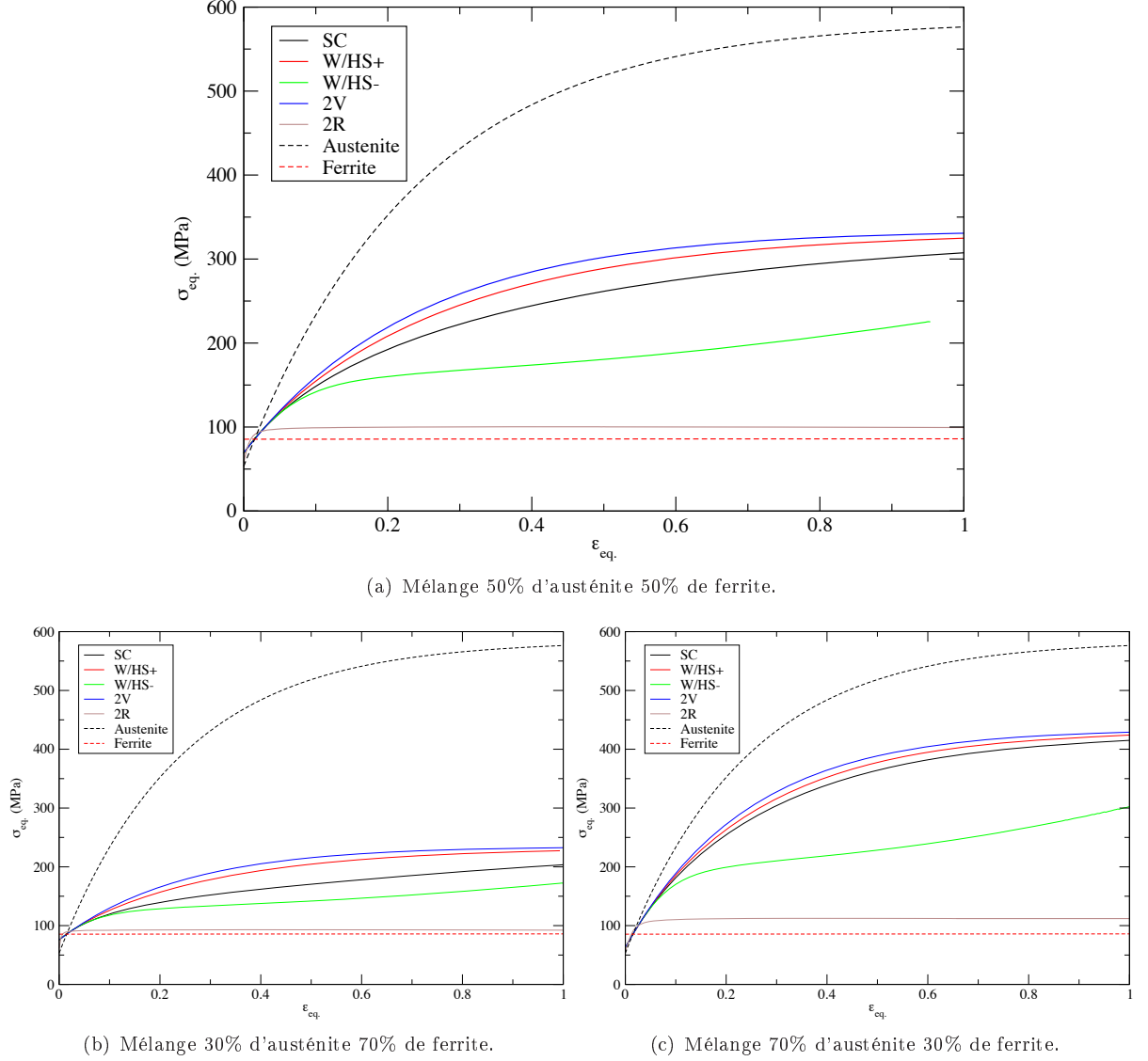


FIG. 6.30: Résultat des simulations pour un contraste fort en présence d'un écrouissage isotrope et pour une vitesse de déformation unitaire.

Vernusse, consistant à associer les croisements qu'il observe sur ses courbes d'écoulement macroscopiques à des effets de distribution des phases, se justifierait donc, dans le cadre de nos modèles, pour des contrastes bien plus élevés que ceux observés dans le cas de nos aciers inoxydables austéno-ferritiques.

Conclusion

L'objectif de ce chapitre était d'essayer de reproduire les observations expérimentales à l'aide d'un modèle tenant compte de la répartition des phases dans le matériau. Les comparaisons ont permis de montrer que les modèles à notre disposition ne permettaient pas d'obtenir les données macroscopiques de Brown. En effet, les écoulements prévus par les modèles sont toujours bien plus durs que ceux observés expé-

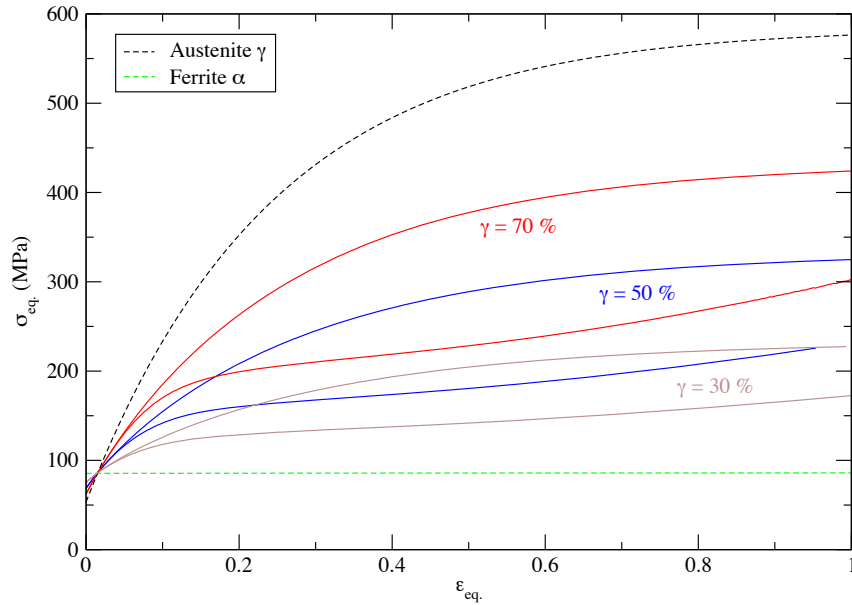


FIG. 6.31: Croisements observables entre les écoulements macroscopiques prévus par différents modèles compris entre W/HS- et W/HS+ pour différentes fractions volumiques de phase dans le cas d'un contraste fictif et pour une vitesse de déformation unitaire.

mentalement. La même conclusion apparaît dans le cas d'un essai de compression axisymétrique sur le matériau D.

Le peu de différence observé entre les modélisations était prévisible du fait du très faible contraste interphase asymptotique (1.36 à 1050°C et 1.54 à 850°C avec correction thermique). Les comparaisons à l'échelle locale nous permettent de voir que ces modèles décrivent tous assez correctement l'évolution d'un milieu présentant peu d'hétérogénéité de déformation entre ses phases. Cependant, on s'aperçoit que pour décrire un matériau présentant des hétérogénéités plus marquées tel le matériau D seul le modèle W/HS- semble encore pertinent. Cette observation montre que nos modélisations s'accordent assez bien avec les résultats expérimentaux à cette échelle. Il est à noter que tous les modèles proposés ici semblent sous-estimer l'hétérogénéité intraphase des déformations. Ceci suggère que, malgré l'adéquation des prévisions en termes de moyennes, la distribution des déformations au sein des phases prévue par les modèles n'est peut être pas cohérente avec les mécanismes réellement mis en jeu lors de la sollicitation du matériau.

En outre, les comparaisons à l'échelle macroscopique et à l'échelle locale font intervenir des matériaux différents. Nous ne pouvons donc pas savoir si les résultats corrects à l'échelle locale auraient conduit à des comparaisons concluantes à l'échelle macroscopique, et inversement nous ne pouvons rien conclure quant aux comportements locaux liés aux données de Brown. Les sections 6.4 et 6.5 ont présenté l'effet de certains paramètres du modèle sur l'écoulement macroscopique afin de déterminer si l'un d'eux pouvait être responsable des différences d'écoulement constatées entre expérience et modélisation. Notre analyse n'ayant révélé que peu d'effet de la texture, de la symétrie de répartition des phases ou encore de la forme de l'écroutissage, nous remettons en question dans le dernier chapitre la modélisation considérée jusqu'à présent pour tenir compte de l'effet de la répartition des phases.

Chapitre 7

Extensions et discussion

Sommaire

7.1	Modélisations alternatives	198
7.1.1	Mise en œuvre	200
7.1.2	Formulations dérivées	202
7.1.3	Quelques résultats	203
7.2	Prise en compte d'un autre mécanisme de déformation	209
7.2.1	Méthode de quantification du glissement interphase	211
7.2.2	Application au matériau modèle	213
7.2.3	Automatisation de la procédure	215
7.3	Critique et prolongement de l'étude	220
7.3.1	Cadre théorique	220
7.3.2	Cadre expérimental	222

Introduction

L'hypothèse sur laquelle se base notre travail est que le comportement des biphasés dépend de la répartition des phases dans le matériau. Nous avons donc développé un modèle ayant pour objectif de décrire des distributions de phases très différentes, en essayant de se détacher du modèle auto-cohérent biphasé "classique".

Les modèles en question ne permettent pas de rendre compte des données expérimentales de Brown [27] qui sont toujours beaucoup plus souples que les écoulements prévus par le modèle. De plus, associées aux données à 1050°C, nos modélisations ne se distinguent pas les unes des autres du fait, sans doute, de la faiblesse du contraste interphase. Deux explications sont proposées afin d'interpréter ces observations. Nous pouvons imaginer, d'une part, que les modèles ne rendent pas bien compte de l'effet de l'agencement des phases et qu'il nous faut alors rechercher une modélisation alternative capable de faire mieux. Nous pouvons considérer, d'autre part, qu'un autre mécanisme est responsable des observations faites par Brown et, peut-être, également des croisements mis en évidence par Vernusse [205] et Al-Jouni [4]. Dans ce chapitre de discussion, nous allons proposer deux pistes suivant chacune l'une de ces voies. Après la présentation de ces extensions, nous discuterons, de façon plus générale, des insuffisances de nos modélisations et des développements qui semblent nécessaires, aussi bien du point de vue théorique que du point de vue expérimental, pour élucider la question de l'influence de la répartition des phases dans les polycristaux biphasés.

7.1 Modélisations alternatives

Les modèles proposés au chapitre 3 présentent l'intérêt principal de fournir une alternative assez simple au modèle auto-cohérent, en faisant appel à des formulations éprouvées de la mécanique des composites (telles les approches de type Hashin et Shtrikman). Cependant ceux-ci souffrent d'un certain nombre de défauts qui pourraient être responsables de leur inaptitude à prévoir, pour un contraste modéré, l'effet supposément dû à la distribution des phases.

La première de ces limitations est l'hypothèse de séparation des échelles à la base de notre formulation. Cette hypothèse limite les interactions entre les grains des différentes phases, ce qui ne permet peut-être pas de décrire correctement l'évolution du matériau et donc celle du comportement. En outre, on perçoit intuitivement que l'hypothèse de séparation d'échelles risque de provoquer une accommodation moyennée sur la phase et non fortement localisée dans certains grains, c'est également ce que semblent révéler les fluctuations intraphases présentées au §6.3.2. Ainsi, l'idée qu'un modèle de type W/HS- pourrait être plus adapté dans le cadre d'un comportement qui semble dominé par la phase molle se base sur l'hypothèse que cette phase va se déformer, dans sa globalité, de façon plus importante que la phase dure. Comme nous l'avons noté précédemment, les valeurs présentées à la table 5.5 permettent de justifier ce point de vue.

Mais, en faisant cette hypothèse, nous ignorons le fait qu'ici ce n'est pas toute la phase molle qui accommode la plus grande part de la déformation, mais plutôt une petite fraction de celle-ci comme le suggère la figure 7.1 présentant en rouge les zones de la grille du matériau D les plus déformées. La table 7.1 associe à ces ensembles très déformés la fraction de ferrite qui les compose et le niveau de déformation équivalente qui constitue le seuillage du champ de déformation. Ainsi, par exemple, la cartographie 7.1(a) présente en rouge les zones associées à une déformation équivalente supérieure à 0.66, ces domaines représentant 1% de la surface totale de la grille et 1.7% de la surface totale de ferrite de cette grille. Les valeurs de cette table montrent que la déformation, loin de se produire de façon homogène dans la phase, privilégie certains grains. On peut raisonnablement considérer que la déformation fait intervenir prioritairement les grains de la phase ferritique les plus "mous" (en un sens à préciser).

De plus, l'accommodation de la déformation par un sous-ensemble particulièrement mou de la phase molle doit permettre d'adoucir le comportement et pourrait donc expliquer l'aspect particulièrement mou des écoulements biphasés mis en évidence par Brown [27].

Au delà de cette difficulté de représentation de la microstructure du matériau se pose la question plus générale de la pertinence de cette information, en elle-même, dans un cadre viscoplastique. La modélisation du matériau introduite au chapitre 3 se base sur une description de l'agencement des phases et des orientations cristallines dans le matériau ; cette description pertinente dans le cadre élastique linéaire semble l'être moins dans un cas non linéaire comme en atteste la figure 7.1. Comme on peut le constater sur ces tracés des champs de déformations, il apparaît dans le matériau des domaines significativement plus

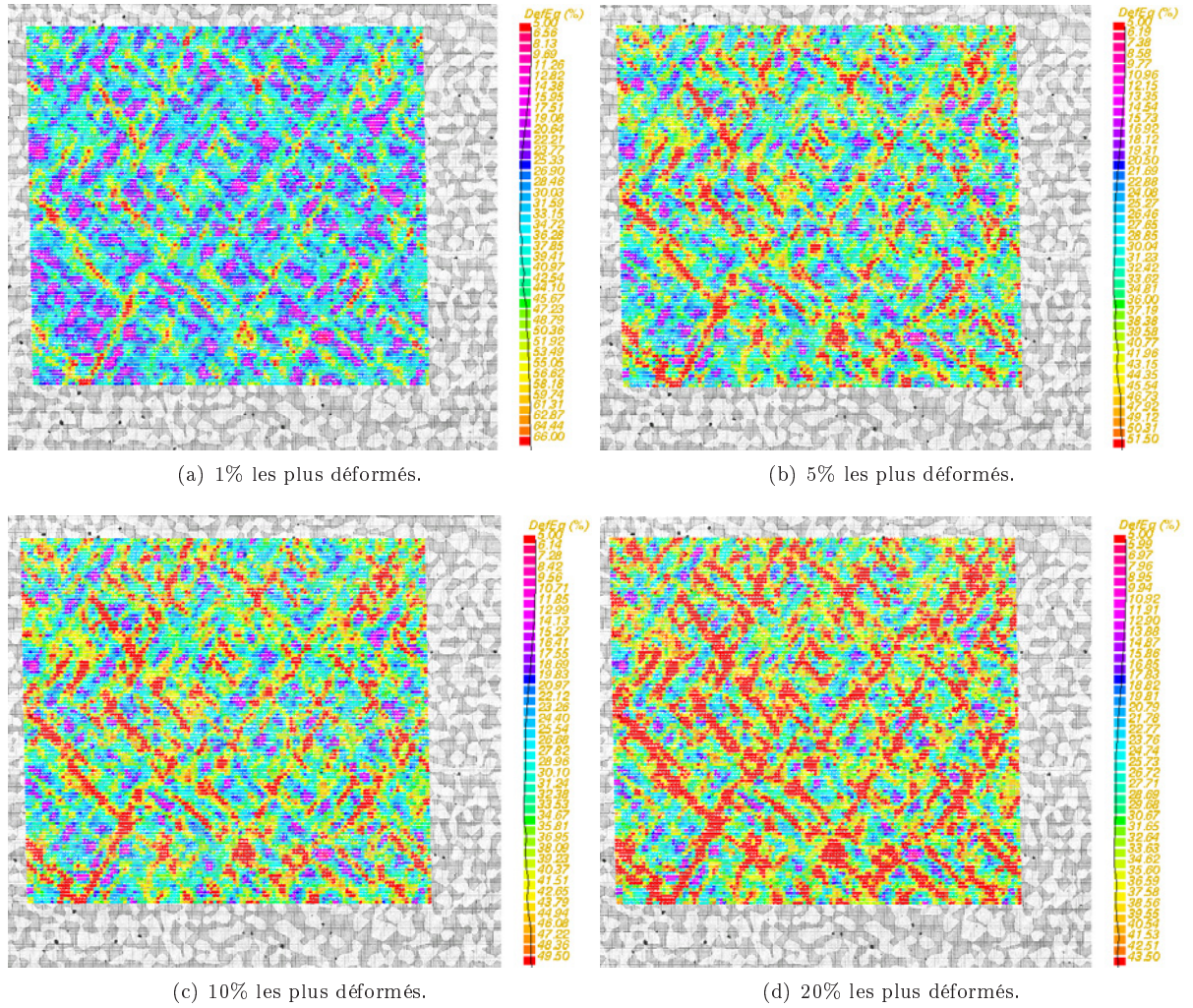


FIG. 7.1: Sur ces graphiques, ont été représentés en rouge les points de mesures présentant les niveaux de déformation les plus élevés. Ces niveaux sont ceux indiqués à la première ligne de la table 7.1.

déformés ne respectant ni la répartition des phases, ni celle des familles d'orientations cristallographiques mais qui doivent néanmoins être influencés par ces paramètres. Nous pouvons alors nous interroger sur la pertinence d'une linéarisation "homogène par phase" dans une telle situation et nous demander s'il ne serait pas préférable d'essayer de définir une microstructure déduite des champs de déformation réellement observés, pour modéliser le milieu linéaire de comparaison.

La mise en œuvre de cette idée, dans le cas présent, pourrait consister à assimiler les bandes de localisation à une phase matrice concentrant majoritairement la déformation et à considérer le reste du matériau comme des inclusions faisant obstacles à cette localisation. Afin, néanmoins, de tenir compte de la microstructure réelle du matériau et des spécificités de la composition des bandes, nous pouvons considérer la

	X% les plus déformés				
du matériau	1%	5%	10%	20%	30%
de la ferrite	1.7%	7.7%	16.5%	31.2%	45.8%
$E_{eq.}$ correspondant	0.66	0.515	0.495	0.435	0.392

TAB. 7.1: Fraction de ferrite présente dans les zones du matériau les plus déformées en pourcents et déformation logarithmique équivalente associée à cet état de localisation. Ces valeurs sont obtenues à partir de la figure 5.49(a).

matrice comme un assemblage particulier de familles d'orientations “molles”. Ce point de vue nous permet donc de rapprocher la description de notre structure polycristalline de celle d'un “composite particulière”. Cette approche peut également trouver une justification plus théorique. En effet, le problème que nous souhaitons traiter est celui de la représentation d'un polycristal biphasé à l'aide d'une formulation à une seule transition d'échelle. Dans ce cadre, la formulation variationnelle de Hashin et Shtrikman semble un point de départ acceptable. Nous savons que cette formulation donne des bornes ou des estimations suivant le choix du milieu de référence (§2.1.4.b), on rappelle à travers les inégalités¹ (7.1) quelques modèles issus de choix particuliers pour le milieu de référence².

$$\mathbb{M}^V \leq \dots \leq \mathbb{M}^{\text{HS}}(\mathbb{M}_+^0) \leq \dots \leq \mathbb{M}^{\text{HS}}(\mathbb{M}^{\text{HS}}) = \mathbb{M}^{\text{SC}} \leq \dots \leq \mathbb{M}^{\text{HS}}(\mathbb{M}_-^0) \leq \dots \leq \mathbb{M}^R \quad (7.1)$$

Dans la situation présente, les bornes de Hashin et Shtrikman ne sont pas réalistes car ni \mathbb{M}_+^0 ni \mathbb{M}_-^0 n'existent dans le matériau, de même le modèle auto-cohérent traite les deux phases de façon trop symétrique par rapport au rôle particulier que semble jouer la ferrite. Nous pouvons donc proposer un nouvel estimateur en définissant un milieu de référence plus souple que le milieu auto-cohérent, mais plus physique que les bornes de Hashin et Shtrikman. Le choix d'un assemblage de grains “mous” semble ainsi une alternative raisonnable.

7.1.1 Mise en œuvre

La définition d'un tel modèle nécessite de fixer une méthode de choix de ces familles d'orientations particulièrement molles. Nous allons considérer que les grains les plus mous sont ceux qui présentent le taux de déformation le plus important, au sens de l'équation (7.2), lorsqu'on impose au polycristal la sollicitation macroscopique $\underline{\underline{\dot{E}}}$.

$$\|\underline{\underline{\dot{\varepsilon}}}^{(r)}\|^2 = \frac{\underline{\underline{\dot{E}}} \otimes \underline{\underline{\dot{E}}}}{\underline{\underline{\dot{E}}} : \underline{\underline{\dot{E}}}} :: \left(\underline{\underline{\dot{\varepsilon}}}^{(r)} \otimes \underline{\underline{\dot{\varepsilon}}}^{(r)} \right) \quad (7.2)$$

Pour pouvoir calculer cette norme, il nous faut connaître l'expression du tenseur de localisation permettant de passer de $\underline{\underline{\dot{E}}}$ à $\underline{\underline{\dot{\varepsilon}}}^{(r)}$. De plus, la modélisation ne retiendra que les $X\%$ les plus mous, ce pourcentage étant censé refléter l'importance de la localisation dans le matériau considéré. Ce modèle introduit donc un paramètre d'ajustement qui caractérise la morphologie du matériau, mais d'une façon moins directe que dans le cas du modèle à deux transitions d'échelles proposé précédemment. En effet, alors que le modèle à deux transitions d'échelles se basait directement sur une description de la microstructure, le nouveau modèle, qui sera désigné sous l'appellation de “modèle avec localisation”, se base plutôt sur une description du champ de déformation³. Le modèle proposé ici n'a donc pas l'orientation prédictive qu'avait l'autre formulation.

Pour déterminer la valeur de la fraction localisée X , nous pouvons nous baser sur le fait que pour accommoder la déformation principalement par cisailon le long des bandes de localisation celles-ci doivent être connexes et traverser le matériau⁴. Les conditions de continuité recherchées semblent apparaître, au vu de la figure 7.1, pour une fraction localisée totale de 10 à 20%, ce qui conduit d'après la table 7.1 à une localisation dans 15 à 30% de la phase ferritique.

La description que nous avons faite du matériau, une matrice de grains mous localisant la déformation et “entourant” des grains plus durs, a été rapprochée de la formulation de Hashin et Shtrikman présentée au chapitre 2. Le milieu de référence \mathbb{M}^0 est lié, ici, au comportement de l'ensemble des grains les plus mous représentés par leur module auto-cohérent $\mathbb{M}_{X\%}^{\text{SC}}$:

$$\mathbb{M}_{X\%}^{\text{SC}} = \left[\sum_r c_{X\%}^r \mathbb{M}^{(r)} : \left(\mathbb{M}^{(r)} + \mathbb{M}^* (\mathbb{M}_{X\%}^{\text{SC}}) \right)^{-1} \right] : [\mathbb{M}_{X\%}^{\text{SC}} + \mathbb{M}^* (\mathbb{M}_{X\%}^{\text{SC}})] \quad (7.3)$$

¹Les inégalités seront à prendre au sens des formes quadratiques.

²Dans ces inégalités \mathbb{M}_+^0 est un tenseur symétrique (majeur et mineur), défini-positif, choisi de façon à ce que :

$$\mathbb{M}_+^0 :: (\underline{\underline{\sigma}} \otimes \underline{\underline{\sigma}}) \leq \mathbb{M}^{(r)} :: (\underline{\underline{\sigma}} \otimes \underline{\underline{\sigma}})$$

où $\underline{\underline{\sigma}}$ est un tenseur des contraintes quelconque. \mathbb{M}_-^0 se définit de façon analogue.

³Ainsi, il est logique que le critère (7.2) fasse intervenir explicitement le chargement macroscopique du matériau car celui-ci doit influencer l'orientation des bandes de localisation.

⁴L'accommodation de la déformation à travers les bandes se produit approximativement suivant le mécanisme suggéré sur l'un des schémas (en bas à droite) de la figure 2.7 présentée au chapitre 2 dans un contexte différent.

où $c_{X\%}^{(r)}$ représente la fraction de la famille d'orientations r dans l'ensemble des grains mous. Le comportement effectif de l'assemblage polycristallin est alors donné par la relation (7.4)

$$\tilde{\mathbb{M}}_{X\%} = \left[\sum_r c^r \mathbb{M}^{(r)} : \left(\mathbb{M}^{(r)} + \mathbb{M}^* (\mathbb{M}_{X\%}^{\text{SC}}) \right)^{-1} \right] : \left[\sum_r c^r \left(\mathbb{M}^{(r)} + \mathbb{M}^* (\mathbb{M}_{X\%}^{\text{SC}}) \right)^{-1} \right]^{-1} \quad (7.4)$$

et le comportement individuel de chaque famille de grains se déduit de la relation de localisation de Hashin et Shtrikman présentée en (2.48) et qui s'exprime ici suivant :

$$\underline{\underline{\dot{\epsilon}}}^{(r)} = \mathbb{A}^{(r)} : \underline{\underline{\dot{E}}} = \mathbb{M}^{(r)} : \mathbb{B}^{(r)} : \left(\tilde{\mathbb{M}}_{X\%} \right)^{-1} : \underline{\underline{\dot{E}}} \quad (7.5a)$$

$$= \mathbb{M}^{(r)} : \left[\mathbb{M}^{(r)} + \mathbb{M}^* (\mathbb{M}_{X\%}^{\text{SC}}) \right]^{-1} : \left[\tilde{\mathbb{M}}_{X\%} + \mathbb{M}^* (\mathbb{M}_{X\%}^{\text{SC}}) \right] : \left(\tilde{\mathbb{M}}_{X\%} \right)^{-1} : \underline{\underline{\dot{E}}} \quad (7.5b)$$

Le calcul des tenseurs taux de déformation locaux fait ainsi intervenir le comportement de référence qui, lui-même, est lié au choix des grains les plus mous : le problème est donc implicite et devra être résolu par itérations. En fait, la procédure utilisée insère une condition supplémentaire dans la procédure de point fixe permettant le calcul du module auto-cohérent classique. La boucle utilisée devient alors celle présentée à la figure 7.2.

Cette nouvelle description morphologique nécessite également de définir une nouvelle méthode de calcul

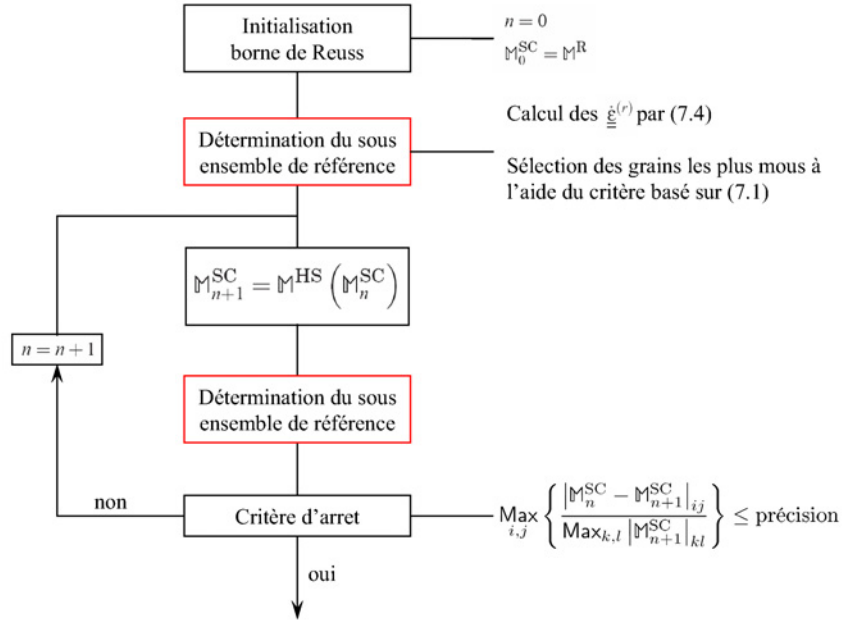


FIG. 7.2: Méthode de calcul du module auto-cohérent avec localisation dans les $X\%$ les plus mous. Les étapes supplémentaires par rapport au calcul auto-cohérent classique sont présentées dans un cadre rouge.

des seconds moments, ces ingrédients étant nécessaires pour la résolution du problème variationnel en utilisant la procédure de minimisation présentée au §3.4. Le calcul utilisé reprend l'expression (3.81) pour :

$$\tilde{\mathbb{M}}_{(I)} = \mathbb{M}^{(r)} \quad \Theta_{(I)} = \Theta^{(r)} \quad \mathbb{A}_{(I)} = \mathbb{A}^{(r)} \quad (7.6)$$

$$\tilde{\mathbb{M}}^0 = \mathbb{M}_{X\%}^{\text{SC}} \quad \tilde{\mathbb{M}}^{\text{HS}} = \tilde{\mathbb{M}}_{X\%} \quad \tilde{\mathbb{M}}^* = \mathbb{M}^* = \mathbb{E}(\mathbb{M}_{X\%}^{\text{SC}}) : \mathbb{M}_{X\%}^{\text{SC}} \quad (7.7)$$

L'expression de la dérivée de \mathbb{M}^* reste similaire à celle proposée précédemment :

$$\frac{\partial \mathbb{M}^*}{\partial \mathbb{M}^{(s)}} = \frac{\partial \mathbb{E}}{\partial \mathbb{M}_{X\%}^{\text{SC}}} :: \frac{\partial \mathbb{M}_{X\%}^{\text{SC}}}{\partial \mathbb{M}^{(s)}} : \mathbb{M}_{X\%}^{\text{SC}} + \mathbb{E} : \frac{\partial \mathbb{M}_{X\%}^{\text{SC}}}{\partial \mathbb{M}^{(s)}} \quad (7.8)$$

mais le calcul de la dérivée du tenseur $\mathbb{M}_{X\%}^{\text{SC}}$ fait apparaître, cette fois, un terme supplémentaire par rapport au calcul réalisé en §3.4.2.

$$\begin{aligned} \frac{\partial \mathbb{M}_{X\%}^{\text{SC}}}{\partial \mathbb{M}^{(s)}} = & \left[\sum_r \frac{\partial c_{X\%}^r}{\partial \mathbb{M}^{(s)}} \otimes \mathbb{M}^{(r)} : \left(\mathbb{M}^{(r)} + \mathbb{M}^* (\mathbb{M}_{X\%}^{\text{SC}}) \right)^{-1} \right] : [\mathbb{M}_{X\%}^{\text{SC}} + \mathbb{M}^* (\mathbb{M}_{X\%}^{\text{SC}})] \\ & + \left[\sum_r c_{X\%}^r \frac{\partial \mathbb{M}^{(r)} : (\mathbb{M}^{(r)} + \mathbb{M}^* (\mathbb{M}_{X\%}^{\text{SC}}))}{\partial \mathbb{M}^{(s)}} \right]^{-1} : [\mathbb{M}_{X\%}^{\text{SC}} + \mathbb{M}^* (\mathbb{M}_{X\%}^{\text{SC}})] \\ & + \left[\sum_r c_{X\%}^r \mathbb{M}^{(r)} : \left(\mathbb{M}^{(r)} + \mathbb{M}^* (\mathbb{M}_{X\%}^{\text{SC}}) \right)^{-1} \right] : \frac{\partial [\mathbb{M}_{X\%}^{\text{SC}} + \mathbb{M}^* (\mathbb{M}_{X\%}^{\text{SC}})]}{\partial \mathbb{M}^{(s)}} \end{aligned} \quad (7.9)$$

En effet, le premier terme traduit l'évolution de la sélection des grains mous lorsqu'une perturbation est imposée à $\mathbb{M}^{(s)}$. Nous considérerons ce terme comme étant nul, ce qui doit être vrai tant que les familles d'orientations sont distinctes les unes des autres. Il en aurait été autrement si, au lieu de considérer des familles d'orientations discrètes, nous avions considéré un champ continu (dans l'espace des orientations) pour représenter l'ensemble des orientations présentes, comme par exemple dans le travail exposé en [41]. Cette remarque étant faite, le calcul des seconds moments consiste, au final, à évaluer $\partial \mathbb{M}_{X\%}^{\text{SC}} / \partial \mathbb{M}^{(s)}$ et $\partial \tilde{\mathbb{M}}_{X\%} / \partial \mathbb{M}^{(s)}$, "uniquement" en utilisant (3.81) une première fois dans un cadre auto-cohérent et une seconde fois sur la formulation de Hashin et Shtrikman. Il est à noter que la dérivée de $\mathbb{M}_{X\%}^{\text{SC}}$ présentée en (7.9) est non nulle seulement pour les familles d'orientations s appartenant à l'ensemble des grains mous, lorsque le premier terme de cette équation est négligé.

L'évolution du matériau et de sa microstructure dans le cadre de ce modèle reste identique à la mise à jour classique dans le cas d'une formulation à une transition d'échelle; en particulier il n'y a qu'un tenseur microstructural pour caractériser toutes les familles d'orientations.

Ce modèle, qui sera noté SC% dans la suite, peut être critiqué sur plusieurs points; citons dès à présent le fait que la représentation du comportement de la "matrice", au travers d'une formulation auto-cohérente, semble discutable. Il en va de même de la symétrie ellipsoïdale attachée à la répartition des constituants. Néanmoins, l'intérêt de cette formulation est de forcer la localisation de la déformation dans un sous-ensemble de l'une des phases : ce qui est bien la situation que nous cherchons à modéliser.

7.1.2 Formulations dérivées

La description qui vient d'être faite du modèle SC% est basée sur des choix particuliers en termes de sélection des grains intervenant dans la fraction molle et en termes de représentation de la structure polycristalline. D'autres hypothèses peuvent être envisagées, celles-ci conduiraient à des modélisations différentes, mais basées sur le même type de raisonnement.

En termes de choix d'un milieu de référence, nous avons pris le parti de considérer le comportement d'un sous-ensemble de grains. Ce choix semble physiquement plus acceptable que celui de la borne basse de Hashin et Shtrikman [43] qui aurait considéré un comportement plus mou que celui de tous les grains car un tel comportement n'existe nulle part dans le matériau. Cependant, nous pouvons noter que le choix de ne sélectionner que les grains les plus mous de la phase molle n'est peut être pas non plus tout à fait réaliste. En effet, l'idée que la déformation du matériau fait jouer un rôle particulier à un sous-ensemble de grains particulièrement mous suppose que ceux-ci présentent une distribution particulière au sein de la microstructure; ils doivent, en quelque sorte, former un chemin connexe dans le matériau pour lui permettre d'accommoder globalement la déformation. Or, pour les faibles valeurs de X , il est peu probable de se trouver dans une telle situation. On peut alors imaginer que le sous-ensemble de référence contient une part importante de grains mous, mais qu'il est également composé de grains supplémentaires d'orientation et de cristallographie aléatoires assurant la "continuité" de l'ensemble.

L'explication précédente peut se reformuler en disant que la sollicitation prévoit l'apparition de bandes de localisation d'orientation donnée. Ces bandes s'initient préférentiellement dans le matériau dans les zones les plus riches en grains mous, mais leur développement fait nécessairement intervenir quelques grains durs qui se trouvent dans leur prolongement.

Le choix de se cantonner, dans le modèle SC%, aux seuls grains de la phase molle est un choix de commodité et ne se justifie pas toujours au début de la déformation, car alors, la phase auténitique peut être légèrement plus souple que la phase ferritique (figure 5.21 ou 6.4(b)). L'écroissage rapide de

l'austénite nous rassure néanmoins quant à la pertinence de cette simplification.

Le fait de ne pas considérer uniquement les grains les plus mous de la phase molle aura tendance à durcir l'écoulement. Les variantes proposées ne seront donc pas traitées dans le cadre de ce travail, l'idée étant ici d'estimer l'effet maximal d'une formulation avec localisation. Dans le cadre d'une étude plus systématique, nous pourrions également nous interroger sur la pertinence de notre critère de sélection et sur l'aspect potentiellement variable du paramètre X au cours d'une sollicitation.

Enfin, il est à noter que ces formulations s'étendent directement à la situation duale, où un ensemble de grains durs joueraient un rôle spécifique dans le matériau, mais l'interprétation physique de ce phénomène semble plus difficile à appréhender.

En termes d'assemblage de l'agrégat, nous pouvons imaginer étendre le modèle SC% dans le cadre d'une modélisation à deux transitions d'échelles afin de cumuler l'effet de la localisation dans un sous-ensemble de la phase molle et l'effet de distribution des phases, qui pourrait être plus marqué du fait d'un contraste plus important entre les grains de la sélection et le reste du matériau. Ce modèle consiste à considérer la phase molle comme un polycristal monphasé présentant une déformation localisée, dans une fraction X de ses familles d'orientations. Le calcul du comportement de la phase ferritique est alors associé à un modèle de Hashin et Shtrikman où le milieu de référence est constitué des grains les plus mous de cette phase. L'assemblage des phases, intervenant à une échelle bien plus grande, peut ensuite être modélisé par une formulation de type Hashin et Shtrikman où le comportement de référence est donné par le sous-ensemble déjà utilisé à l'échelle de la phase ferritique, la phase auténitique étant considérée comme un assemblage auto-cohérent de ses familles d'orientations.

L'écriture de ce modèle ne pose pas de difficulté particulière, bien qu'elle soit un peu plus complexe que celle de la formulation à une transition d'échelles. Ce modèle a également été implémenté dans VARIPOLY et sera désigné par la notation W/HS%⁵.

Remarque : Identification de l'écoulement des phases pures

Nous considérons ici, de façon quelque peu arbitraire, que l'effet de localisation n'existe que dans les matériaux biphasés. Ainsi, on pourra continuer à utiliser les paramètres d'écrouissage identifiés sur les phases pures à l'aide d'un modèle auto-cohérent classique. On peut justifier cette idée intuitivement, en considérant que la déformation est plus homogène dans le cas d'un matériau monphasé que dans le cas d'un matériau biphasé. Pour pouvoir estimer la validité de cette hypothèse, l'observation du champ de déformation local dans le polycristal ferritique est nécessaire. Des simulations avec localisation pourraient également être menées sur les polycristaux monphasés afin d'apprécier l'importance des différences prévues dans le cadre de ces modèles⁶. Celles-ci n'ont pas été réalisées dans le cadre de ce travail exploratoire.

7.1.3 Quelques résultats

Cette section ne présente que quelques résultats qui nous ont paru significatifs pour caractériser les modèles avec localisation. Tous les outils sont disponibles aujourd'hui pour mener une étude plus poussée de ces modèles mais, dans le cadre de cette discussion, nous souhaitons uniquement montrer l'intérêt et les limites de ces approches.

Nous avons vu précédemment à la figure 4.17, que le modèle W/HS- pouvait conduire à une accommodation privilégiée de la déformation dans la phase molle pour les contrastes importants. Notre objectif est de voir si les modèles SC% et W/HS% peuvent permettre une localisation plus marquée du taux de déformation dans cette phase. Pour ce faire, nous pouvons tracer la déformation instantanée moyenne par phase pour différents contrastes et différentes valeurs du paramètre X . Les courbes obtenues, pour $n_\gamma=6.8$ et $n_\alpha=4.4$ sont présentées à la figure 7.3. Ces graphes permettent de remarquer que ces modèles provoquent une localisation du taux de déformation dans la phase molle qui peut être bien plus importante que dans le cas du modèle W/HS- mais que, pour que cet effet soit significatif, la fraction X doit être suffisamment faible. On peut noter également que cette localisation est plus marquée dans le cas du modèle W/HS% que dans le cas SC%. La ligne verticale pointillée apparaissant sur ces tracés matérialise le niveau de contraste asymptotique identifié sur les données de Brown ($\tau_c^\gamma(\Gamma = \infty)/\tau_c^\alpha(\Gamma = \infty) = 53/39 \approx 1.36$).

⁵Notons que W/HS% pour $X=100\%$ s'identifie au modèle W/HS-.

⁶De faibles différences sont attendues dans le cas de ce matériau peu contrasté, ce qui légitimerait l'emploi du modèle auto-cohérent classique pour l'identification des paramètres d'écrouissage.

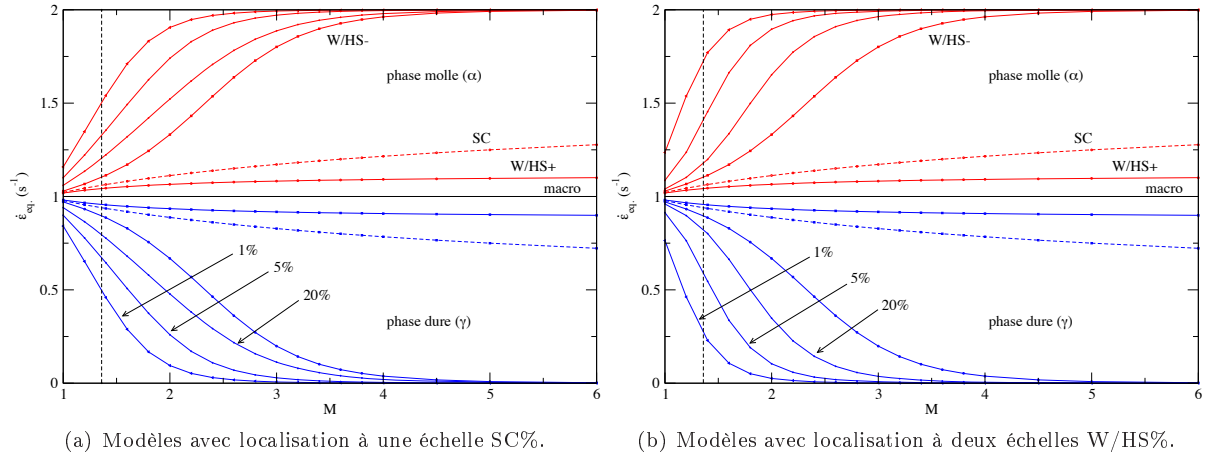


FIG. 7.3: Taux de déformation moyen prévu dans chaque phase en fonction du contraste entre les phases et du modèle d'arrangement considéré. Le trait pointillé vertical indique le contraste asymptotique sur les cissons de références déterminées au chapitre précédent pour les données de Brown à 1050°C.

Nous pouvons comparer les résultats fournis par ces modèles aux données expérimentales de Brown [27], comme nous l'avons fait à la figure 6.5 pour le modèle auto-cohérent biphasé. La figure 7.4 montre que pour espérer trouver une meilleure concordance modèle/expérience il faut imposer une très forte localisation. Ainsi, pour une fraction X de l'ordre de quelques pourcents, les figures 7.5 et 7.6 montrent

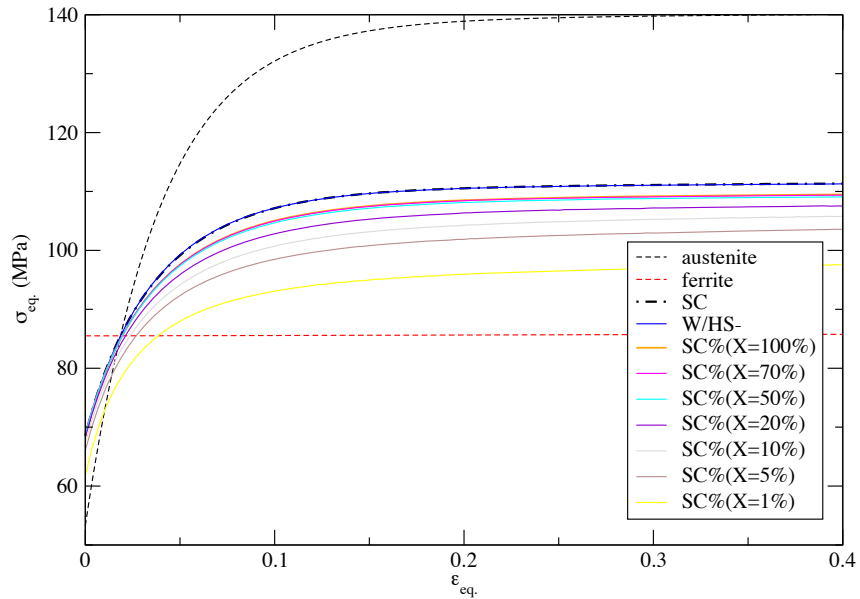


FIG. 7.4: Evolution de l'écoulement macroscopique d'un matériau comprenant 50% d'austénite en fonction de la fraction localisée pour une sollicitation à 1050°C et une vitesse de déformation équivalente unitaire.

qu'une meilleure adéquation peut être obtenue pour les écoulements macroscopiques. Une localisation aussi drastique ne semble pas réellement crédible au vu des cartographies proposées à la figure 7.1 (qui sont toutefois relatives à un autre matériau). Cette observation va dans le sens de l'existence d'un autre mécanisme de déformation non considéré ici et jouant un rôle significatif dans l'adoucissement des courbes d'écoulement observées.

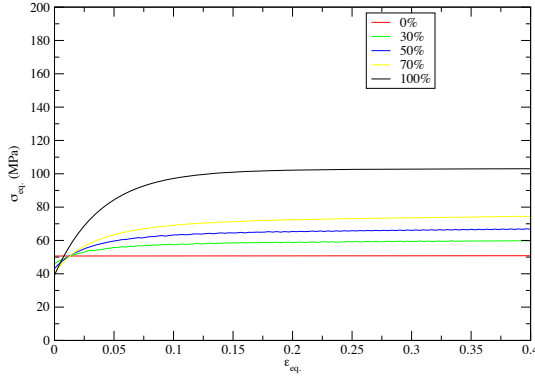
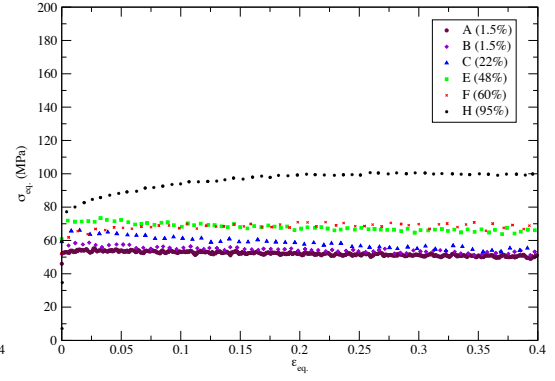
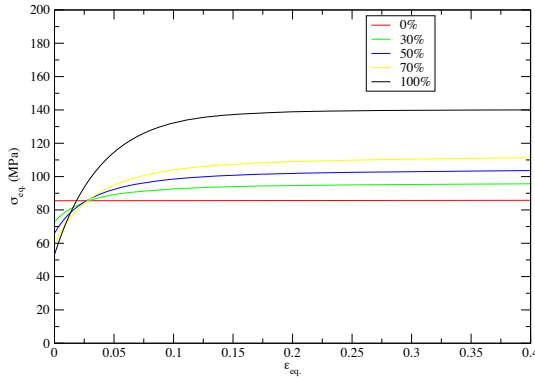
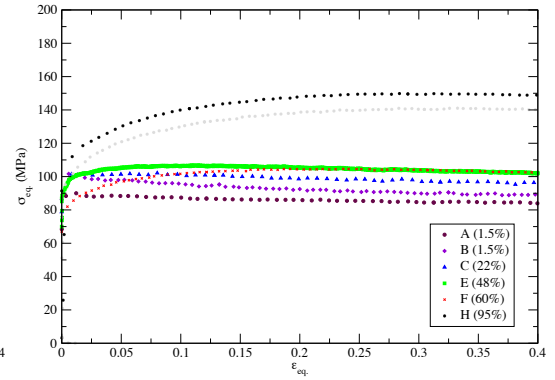
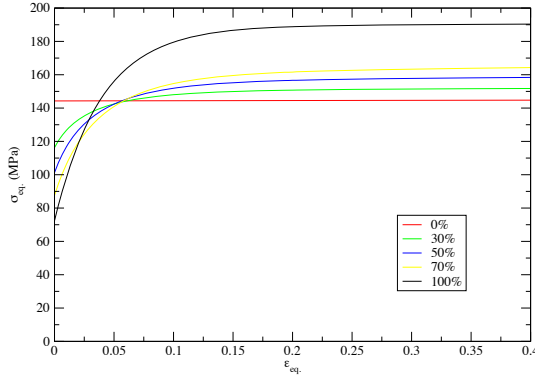
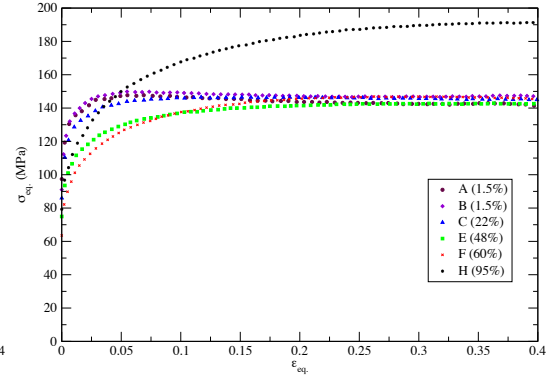
(a) Simulation (vitesse de déformation de $0.1s^{-1}$).(b) Données expérimentales ($0.1s^{-1}$).(c) Simulation (vitesse de déformation de $1s^{-1}$).(d) Données expérimentales ($1s^{-1}$).(e) Simulation (vitesse de déformation de $10s^{-1}$).(f) Données expérimentales ($10s^{-1}$).

FIG. 7.5: (Colonne de gauche) Modélisation du comportement des polycristaux biphasés à l'aide d'un modèle SC% pour $X=5\%$ et des paramètres d'écrouissage identifiés à partir des phases pures de Brown. (Colonne de droite) Résultats expérimentaux de Brown réalisés à $1050^{\circ}C$. Les pourcentages précisés pour chacune des courbes se rapportent à la fraction d'austénite dans le matériau.

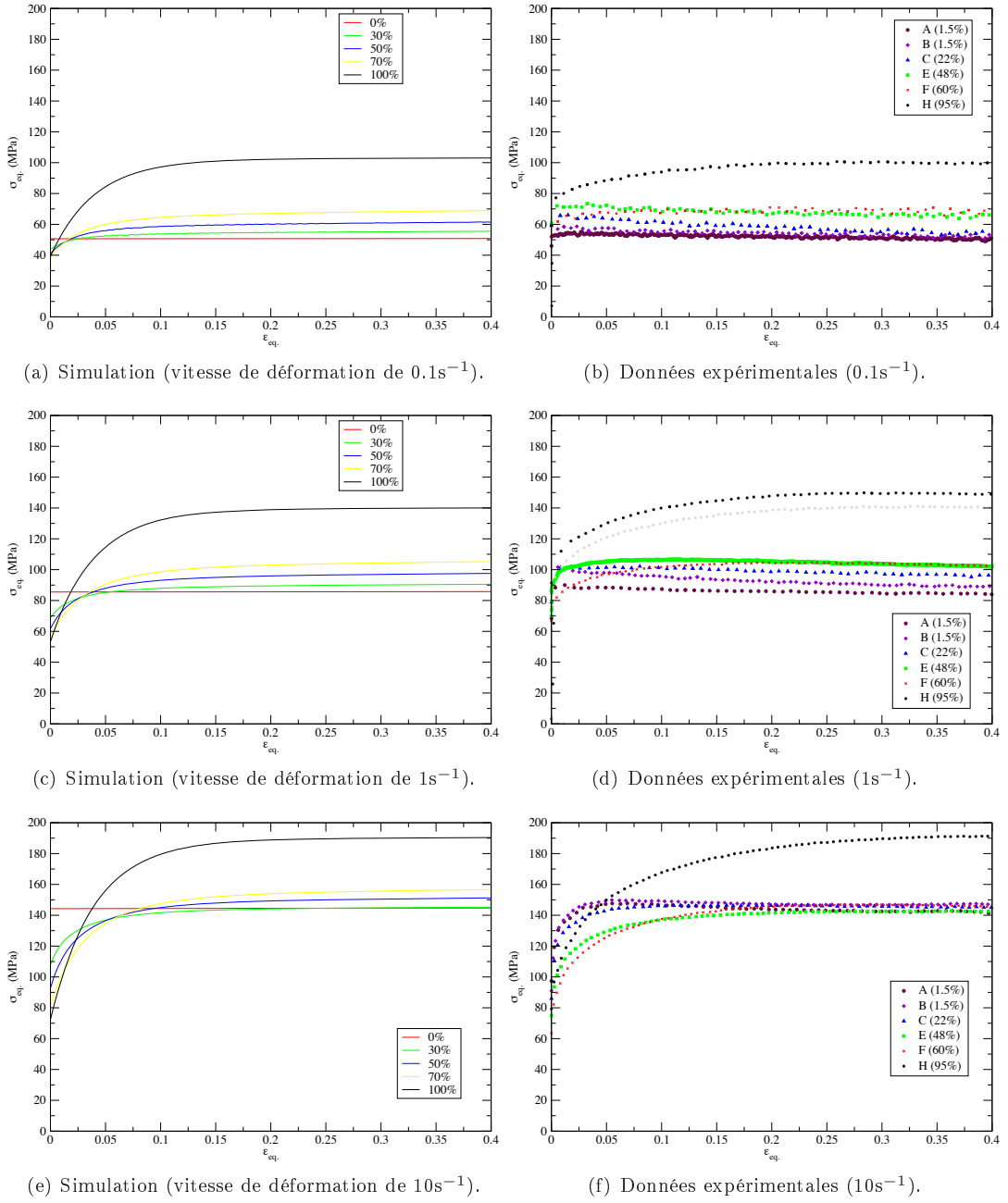


FIG. 7.6: (Colonne de gauche) Modélisation du comportement des polycristaux biphasés à l'aide d'un modèle SC% pour $X=1\%$ et des paramètres d'écrouissage identifiés à partir des phases pures de Brown. (Colonne de droite) Résultats expérimentaux de Brown réalisés à 1050°C . Les pourcentages précisés pour chacune des courbes se rapportent à la fraction d'austénite dans le matériau.

Lorsque l'on se replace dans la configuration du matériau modèle à 850°C en utilisant les corrections thermiques introduites au chapitre 6, nous montrons à la table 7.2 que pour une fraction localisée, de l'ordre de celle estimée au vu de la figure 7.1, nous obtenons des différences de déformations moyennes importantes entre les deux phases (plus importantes que celles obtenues à la table 6.8 dans le cadre d'un modèle à deux transitions d'échelles). La figure 7.7 et la table 7.3 proposent une autre représentation de ce phénomène. Cette observation est très encourageante car elle montre que cette nouvelle classe de

Macroscopique	SC et SC%	ε_{DN}	ε_{DL}	ε_{DT}	$\varepsilon_{DN/DL}$	$\varepsilon_{eq.}$
		-31.68	26.12	5.50	5.16	34.35
Austénite	mesure (avec interface)	-29.80	24.68	5.12	4.84	32.35
	mesure (sans interface)	-26.94	22.43	4.51	4.46	29.31
	SC	-29.47	24.58	4.85	4.62	32.06
	SC% (X=30%)	-24.94	21.05	3.86	4.67	27.38
	SC% (X=15%)	-23.38	19.72	3.64	4.50	25.70
Ferrite	mesure (avec interface)	-34.11	28.20	5.91	5.50	37.01
	mesure (sans interface)	-35.98	29.87	6.11	5.85	39.09
	SC	-33.81	27.48	6.27	5.99	36.62
	SC% (X=30%)	-38.56	31.26	7.22	4.42	41.30
	SC% (X=15%)	-40.21	32.73	7.41	3.24	42.95

TAB. 7.2: Moyennes des déformations logarithmiques fournies par les modèles avec localisation et par le modèle auto-cohérent pour des conditions de sollicitation conduisant aux déformations macroscopiques reportées table 5.4 pour le matériau D. Les valeurs en pourcents reportées dans cette table sont obtenues en utilisant la correction thermique préconisée au chapitre 6. Les déformations moyennes par phases mesurées (issues également de la table 5.4) sont reportées ici par commodité.

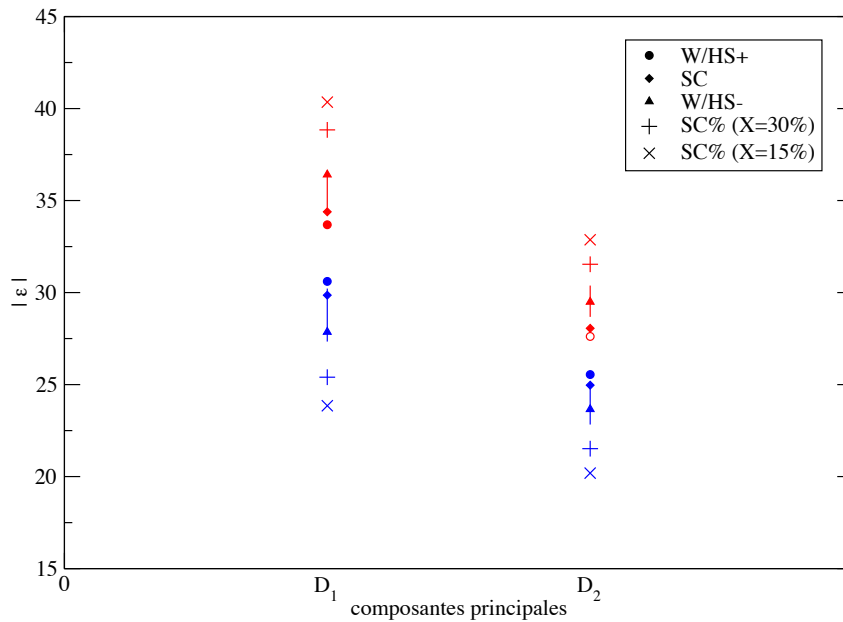


FIG. 7.7: Comparaison des déformations moyennes par phase obtenues expérimentalement et à l'aide des modèles pour le matériau modèle à 850°C (D_1 et D_2 sont les valeurs absolues des deux plus grandes valeurs principales).

modèles permet d'obtenir des différences importantes par rapport au modèle auto-cohérent même pour

	Austénite				Ferrite			
	mesure	SC	SC% (X=30%)	SC% (X=15%)	mesure	SC	SC% (X=30%)	SC% (X=15%)
D_1	[27.34 ; 30.22]	29.86	25.40	23.85	[34.60 ; 36.50]	34.39	38.84	40.35
D_2	[22.83 ; 25.11]	24.97	21.52	20.19	[28.68 ; 30.38]	28.06	31.54	32.87

TAB. 7.3: Valeurs principales maximales en valeur absolue dans le cas du matériau D à 850°C. Ces données sont représentées graphiquement à la figure 7.7 (les données liées aux modèles $W/HS\pm$ sont disponibles table 6.9).

des contrastes interphase faibles⁷.

En outre, si l'on s'intéresse aux fluctuations interphase (figure 7.8) en traçant des graphes similaires à ceux déjà utilisés figures 6.20 et 6.22, on note une augmentation de la fluctuation intraphase des moyennes des déformations qui se rapproche maintenant de la densité estimée expérimentalement.

Bien que nous n'ayons pas accès au comportement macroscopique au cours de cet essai sur le matériau D,

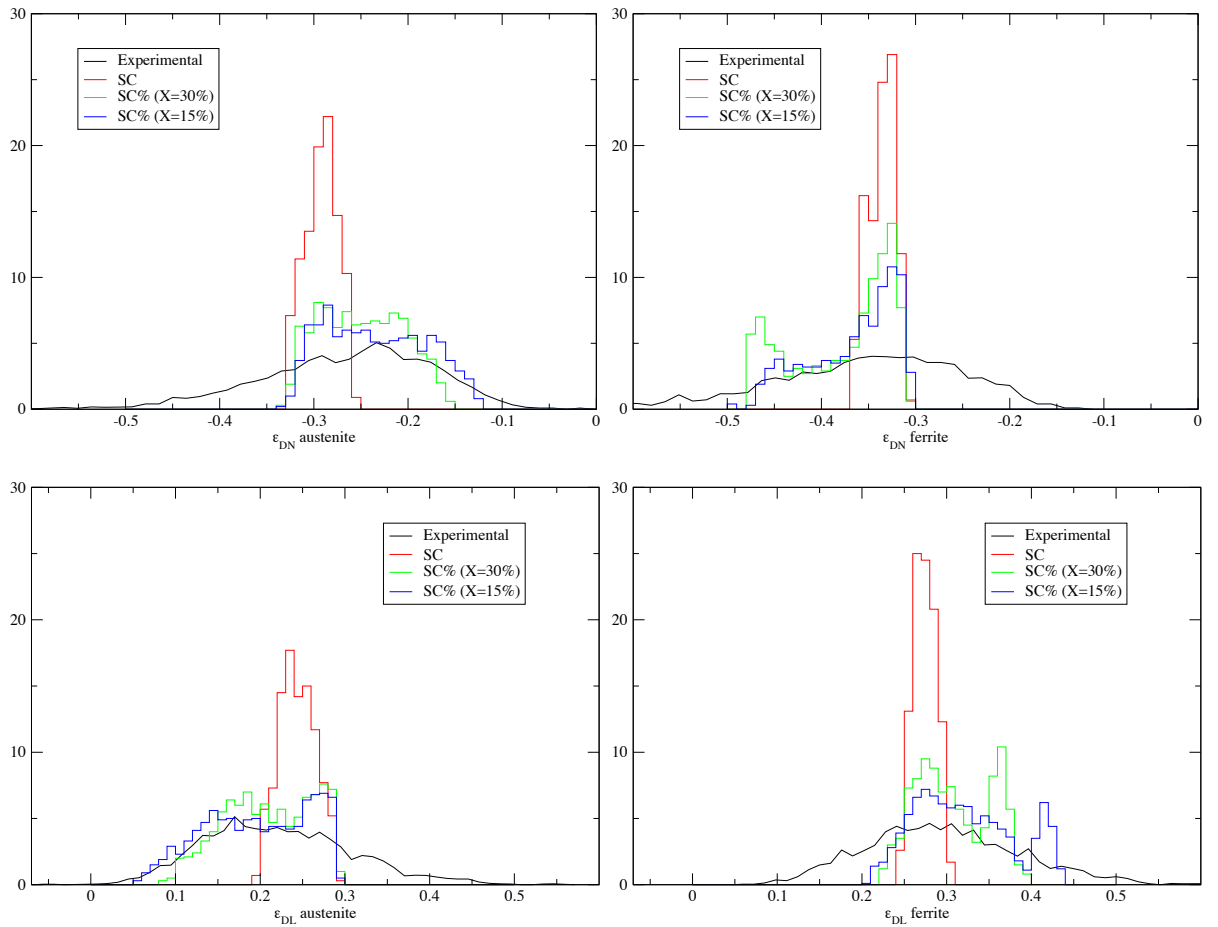


FIG. 7.8: Représentation des fluctuations des moyennes des déformations au sein de chaque famille d'orientations pour chaque phase. Le matériau considéré est le matériau D (la densité mesurée expérimentalement est présentée en noir) et son comportement est corrigé lors des simulations suivant la méthode introduite au chapitre 6.

nous pouvons comparer les écoulements macroscopiques prévus par $SC\%(X = 15\%)$ et $SC\%(X = 30\%)$ aux mesures déjà présentées à la figure 6.14 pour un essai axisymétrique dans les mêmes conditions de vitesse et de température (figure 7.9). Ces comparaisons montrent qu'un léger adoucissement est obtenu

⁷Cette observation pourrait justifier l'emploi d'une des formulations proposées au §7.1.2 dans laquelle des grains durs seraient également intégrés à la matrice.

par rapport au modèle auto-cohérent et aux modèles à deux transitions d'échelle (figure 6.19). Cette tendance nous rapproche donc également des observations expérimentales.

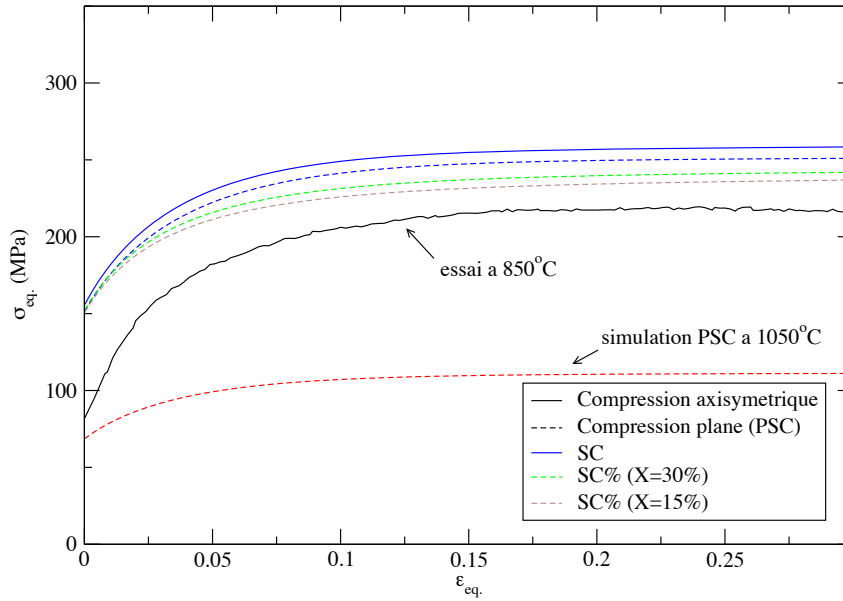


FIG. 7.9: Comparaison de l'écoulement macroscopique pour le modèle auto cohérent et le modèle avec localisation. La courbe relative à l'essai présenté est la même que celle de la figure 5.25(a). Elle se rapporte à un essai de compression axisymétrique à vitesse unitaire mené à 850°C sur le matériau D.

Remarque : Croisement des courbes dans le cas avec localisation

Pour les niveaux de très forte localisation utilisés aux figures 7.5 et 7.6 des croisements peuvent intervenir entre les courbes d'écoulement macroscopique, pour différentes fractions volumiques, si l'on considère que tous les matériaux ne présentent pas la même fraction localisée. Ces croisements sont représentés figure 7.10. Sur ces graphes, les courbes d'une même couleur sont associées à une même fraction volumique, les tracés se rapportent respectivement aux modèles SC, SC%(X=5%) et SC%(X=1%) lorsque l'on va de l'écoulement le plus dur vers le moins dur.

A l'issue de cette section, on note que ce modèle semble plus adéquat que les formulations précédentes en rendant compte d'un adoucissement macroscopique plus prononcé, d'une hétérogénéité intraphase moyenne plus marquée et de fluctuations intraphases plus importantes. Néanmoins, cette formulation ne permet d'approcher les résultats macroscopiques de Brown que pour des valeurs assez improbables du paramètre X. Ainsi, l'existence d'un phénomène supplémentaire intervenant dans le cadre des données de Brown semble probable. Nous allons ébaucher l'étude d'un tel mécanisme à la section suivante.

7.2 Prise en compte d'un autre mécanisme de déformation

Les modèles considérés précédemment ne permettent de reproduire les courbes d'écoulement macroscopique que pour des fractions localisées peu réalistes. Cette observation conduit à imaginer qu'un mécanisme supplémentaire, non considéré actuellement dans les modèles, pourrait adoucir l'écoulement macroscopique.

L'analyse des micro-grilles présentées figure 5.47(a) révèle l'existence de glissements intergranulaires. Ce phénomène semble apparaître de façon privilégiée entre les grains appartenant à des phases différentes (figure 7.11), bien que Hernandez Castillo [73] ait noté que ce glissement pouvait intervenir de façon exceptionnelle entre grains de même phase dans notre matériau biphasé. Ce type de glissement a déjà été observé dans d'autres matériaux métalliques, dans des cas monophasés (acier inoxydable austénitique) figure 7.12(a) ou biphasés (titane) figure 7.12(b). La technique des micro-grilles est un moyen idéal (figure

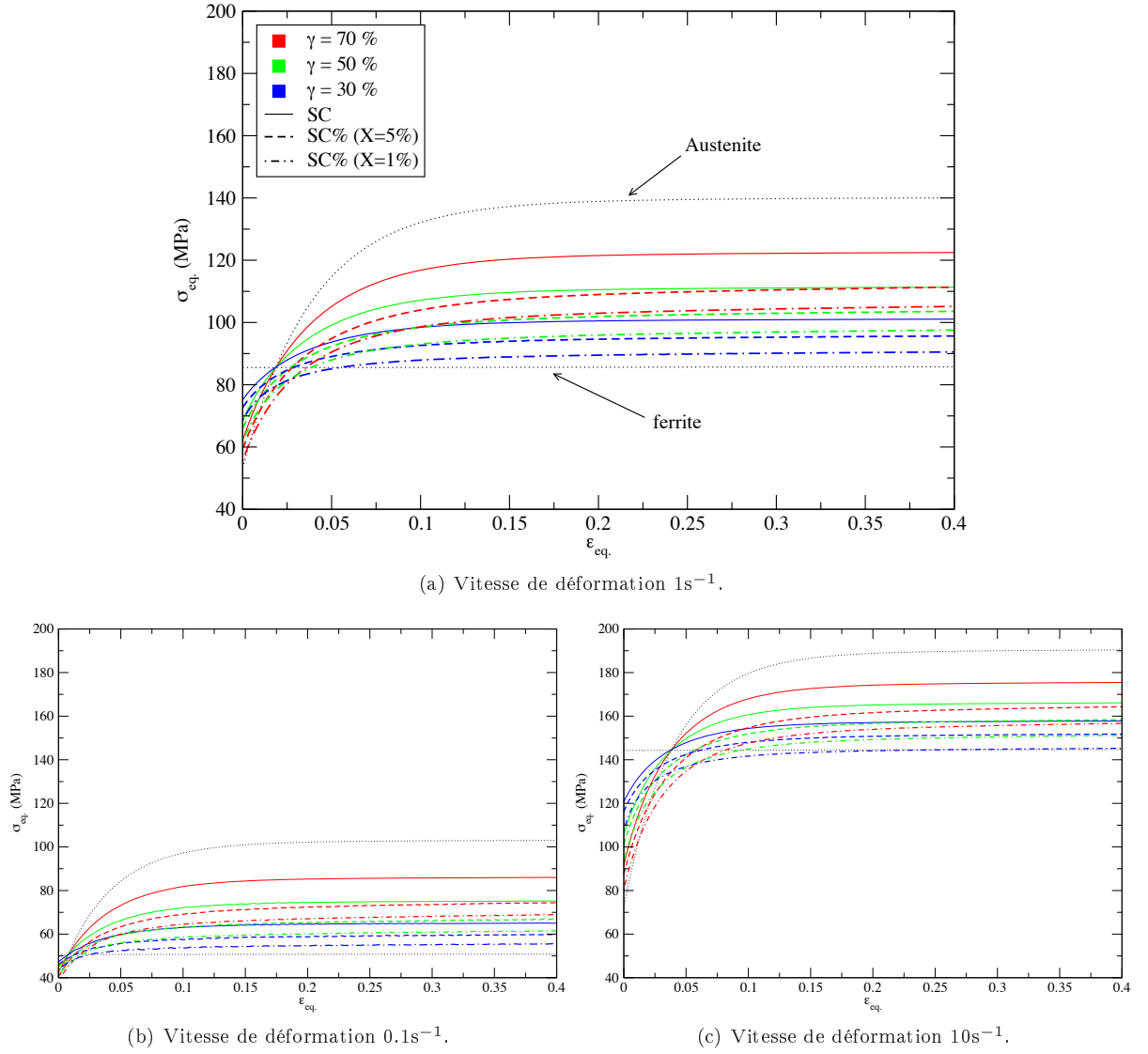


FIG. 7.10: Observation de croisements sur les courbes d'écoulement macroscopique pour différentes fractions localisées et différentes fractions de phase en présence.

7.12) pour mettre en évidence les discontinuités révélant ce phénomène. Cette méthode permet, en outre, une analyse beaucoup plus systématique que celle proposée par [146] et basée sur un suivi de rayures. Bien que le glissement ait déjà été mis en évidence dans les aciers inoxydables austéno-ferritiques sollicités à haute température, il n'a encore, à notre connaissance, jamais été quantifié. Nous proposons, dans cette section, une méthode de quantification de la contribution à la déformation du glissement interphase. Cette analyse peut être utile pour plusieurs raisons. Tout d'abord, elle peut nous permettre d'estimer l'importance de la contribution de ce phénomène sur la déformation du matériau. Elle peut également nous permettre de savoir si ce mécanisme est en lien avec la formation des bandes de localisation et plus généralement nous aider à comprendre les conditions d'apparition d'un tel phénomène. Enfin, cette information peut servir de donnée d'entrée ou de validation pour la modélisation de ce mode de déformation.

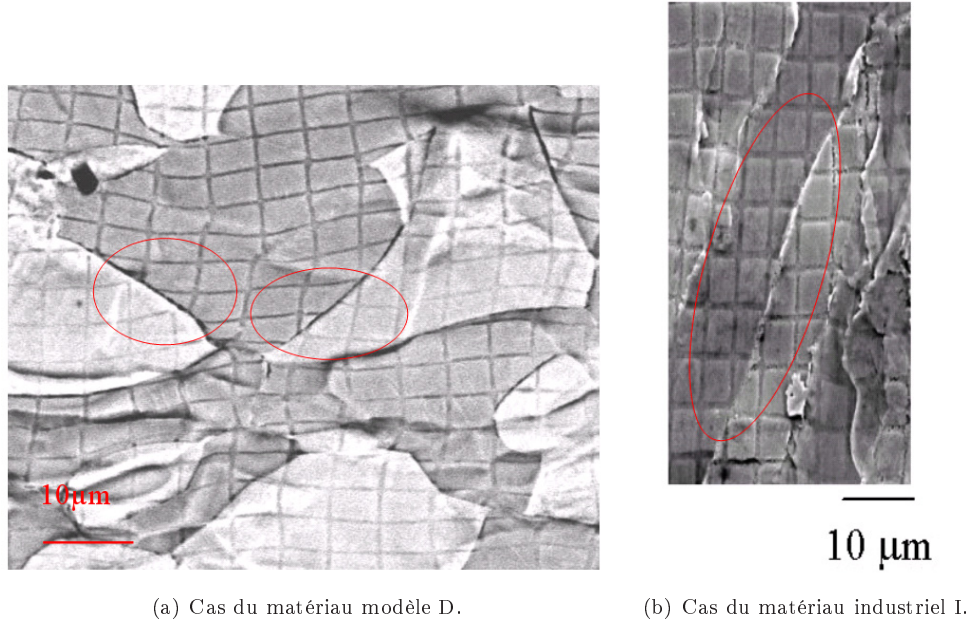
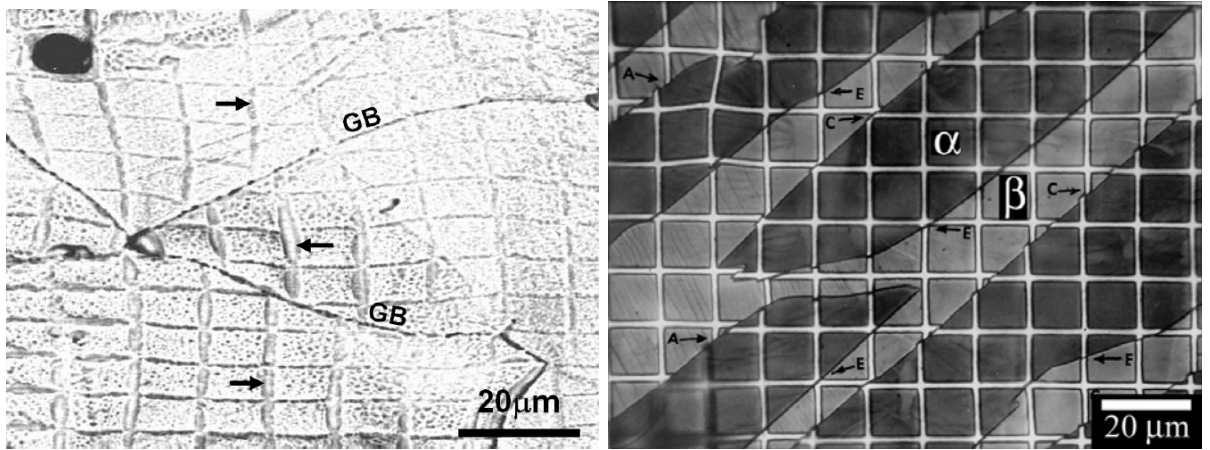


FIG. 7.11: Observation de glissements interphases dans les matériaux étudiés.



(a) Glissements entre grains d'acier inoxydable austénitique (b) Glissements interphases dans le titane sollicité à tempéré-comprenant 30% de nickel sollicités en compression plane à rature ambiante d'après [5] (microscopie optique). 900°C, d'après [73].

FIG. 7.12: Exemples de glissements intergranulaires révélés par la présence de micro-grilles.

7.2.1 Méthode de quantification du glissement interphase

La quantification du glissement repose sur une idée simple. Dans le cadre de la déformation d'un milieu continu la moyenne du gradient de la transformation s'écrit comme :

$$\langle \underline{F} \rangle = c^\alpha \langle \underline{F} \rangle_\alpha + c^\gamma \langle \underline{F} \rangle_\gamma \quad (7.10)$$

Dans un cas discontinu cette quantité fait intervenir une contribution supplémentaire $\underline{\Delta F}$ liée au glissement ou encore une correction $\langle \underline{F} \rangle_\gamma^*$ lorsque l'on intègre le glissement au gradient de la transformation

de la phase γ :

$$\langle \underline{\underline{F}} \rangle = c^\alpha \langle \underline{\underline{F}} \rangle_\alpha + c^\gamma \langle \underline{\underline{F}} \rangle_\gamma + \underline{\underline{\Delta F}} \quad (7.11a)$$

$$= c^\alpha \langle \underline{\underline{F}} \rangle_\alpha + c^\gamma \langle \underline{\underline{F}} \rangle_\gamma^* \quad (7.11b)$$

Cette contribution peut être explicitée en fonction de la discontinuité de déplacement à l'interface à travers l'équation (7.12).

$$\underline{\underline{\Delta F}} = \int_I [\![\underline{u}]\!] \otimes \underline{n} dS_{\underline{x}} \quad (7.12)$$

où I désigne les interfaces séparant les deux phases et où $[\![\underline{u}]\!] = \underline{u}_j - \underline{u}_i$ avec \underline{n} orienté de i vers j . L'estimation de $\underline{\underline{\Delta F}}$ peut se déduire de la connaissance de $\langle \underline{\underline{F}} \rangle$, $\langle \underline{\underline{F}} \rangle_\alpha$ et $\langle \underline{\underline{F}} \rangle_\gamma$. Ces différents termes peuvent être estimés, à leur tour, à partir de la méthode exposée au chapitre 5 donnant, à l'aide d'intégrales de contour, les expressions approchées (5.13) du gradient moyen de la transformation sur un domaine borné. Par exemple, on déduit ces différents termes en considérant le déplacement le long des contours représentés à la figure 7.13 pour un petit élément de grille. On notera que les points discrétisant

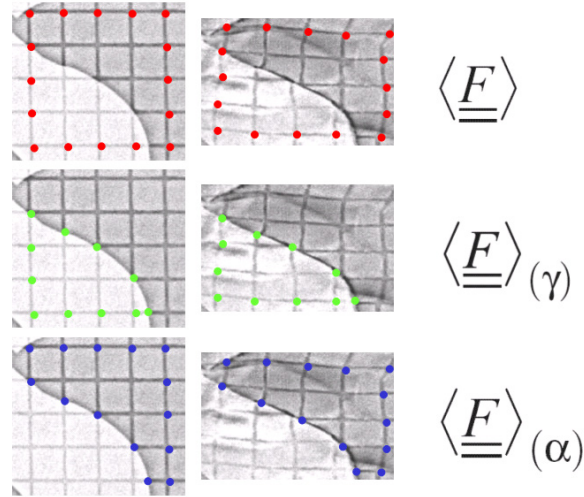


FIG. 7.13: Exemple de mesure de la contribution du glissement sur un élément de grille.

l'interphase sont choisis de façon à être à l'intersection de barreaux horizontaux ou verticaux de la grille, et que les points après déformation suivent l'évolution de ces intersections interphase/grille dans la phase que nous souhaitons caractériser. Dans cet exemple, la contribution du glissement est estimée, à l'aide de (7.11a), et reportée dans la table 7.4, sachant que la composition de la zone considérée est de 41% d'austénite et de 59% de ferrite⁸.

Composante	DL	DN	DL/DN	DN/DL	fraction volumique
$\langle \underline{\underline{F}} \rangle - \underline{\underline{I}}$	21.62	-22.36	10.66	-6.96	100
$\langle \underline{\underline{F}} \rangle_\gamma - \underline{\underline{I}}$	14.76	-18.82	2.91	-5.53	41
$\langle \underline{\underline{F}} \rangle_\alpha - \underline{\underline{I}}$	18.58	-22.31	7.69	-5.12	59
$\langle \underline{\underline{\Delta F}} \rangle$	4.6	-1.48	4.93	-1.67	/

TAB. 7.4: Exemple de calcul de $\underline{\underline{\Delta F}}$ à partir de l'échantillon de grille présenté figure 7.13. Les valeurs contenues dans cette table sont en pourcents.

⁸Cette mesure de la partition de la surface considérée est également obtenue à partir des intégrales de contour (équation (5.14)).

7.2.2 Application au matériau modèle

La quantification du glissement à l'échelle de toute la microgrille du matériau D (figure 5.43) se fait en utilisant la même technique que celle utilisée sur l'élément présenté comme exemple figure 7.13, à la différence près que nous estimerons plutôt $\langle \underline{F} \rangle_\gamma$ et $\langle \underline{F} \rangle_\gamma^*$, définis en (7.11a), pour déterminer $\underline{\Delta F}$.

Pour ce faire, nous commençons par décrire le contour de la phase austénitique dans la configuration non déformée⁹ (115 contours pour un total de 7420 points). L'estimation de $\langle \underline{F} \rangle_\gamma$ peut être obtenue à partir de la connaissance de ces points initiaux et de celle des points homologues suivant le mouvement de l'austénite dans la configuration déformée. De même, $\langle \underline{F} \rangle_\gamma^*$ s'obtient en considérant les points homologues appartenant à la phase ferritique. La construction de ces points a été réalisée "à la main" dans le cas qui nous intéresse tant pour le positionnement des points initiaux que des points après déformation, ce qui a nécessité environ trois jours de travail. Mais une procédure de détermination semi-automatique est proposée dans la suite afin de faciliter cette mesure si l'on souhaite traiter plusieurs images¹⁰.

Les résultats obtenus sur le matériau D sont résumés à la table 7.5, les nouveaux résultats concernent les trois dernières lignes, les autres valeurs ayant été obtenues à partir de la caractérisation réalisée au chapitre 5. On rappelle (§5.3.1) que $\langle \underline{F} \rangle_\gamma^+$ est le gradient moyen de la transformation de la phase austénitique calculé à partir d'un contour extérieur (calcul "avec interface"), alors que $\langle \underline{F} \rangle_\gamma^-$ constitue une mesure similaire mais basée, cette fois, sur un contour intérieur à la phase (calcul "sans interface"). La

Composante	DL	DN	DL/DN	DN/DL	fraction volumique
$\langle \underline{F} \rangle - \underline{I}$	30.34	-27.31	8.22	-0.51	100
$\langle \underline{F} \rangle_\gamma^+ - \underline{I}$	28.20	-25.95	8.10	-0.97	69
$\langle \underline{F} \rangle_\gamma^- - \underline{I}$	25.33	-23.80	7.86	-1.27	33
$\langle \underline{F} \rangle_\gamma - \underline{I}$	24.55	-23.23	7.21	-1.04	52.2
$\langle \underline{F} \rangle_\gamma^* - \underline{I}$	26.24	-23.76	7.52	-0.93	52.2
$\langle \underline{\Delta F} \rangle$	0.88	-0.28	0.16	0.06	/

TAB. 7.5: Cette table présente le gradient du déplacement calculé à l'aide de diverses méthodes, la contribution du glissement $\underline{\Delta F}$, et à la dernière colonne la fraction de grille "entourée" lors de l'estimation des intégrales de contour. Toutes les valeurs sont exprimées en pourcents.

procédure décrite ici permet d'améliorer certaines prévisions faites en utilisant la méthode classique appariant les intersections de grilles avant et après déformation. En effet, la nouvelle discrétisation décrit mieux les domaines de phases du matériau puisque les points sont positionnés sur l'interface, ce qui est visible lorsque l'on considère les fractions volumiques mises en jeu suivant le mode de calcul.

Remarque : Déformation moyenne par phase du matériau D

On peut ainsi, par exemple, à partir de ces données obtenir des valeurs de déformations logarithmiques moyennes par phase plus précises que celles de la table 6.5. La table 7.6 nous fournit ces nouvelles valeurs, nous pouvons noter que ces mesures sont inférieures aux estimations basées sur le calcul classique "sans interfaces". Ce phénomène était déjà visible table 7.5 où les inégalités intuitives (7.13) n'étaient pas vérifiées.

$$\left| \langle \underline{F} \rangle_\gamma^+ \right|_{ij} \geq \left| \langle \underline{F} \rangle_\gamma^* \right|_{ij} \geq \left| \langle \underline{F} \rangle_\gamma \right|_{ij} \geq \left| \langle \underline{F} \rangle_\gamma^- \right|_{ij} \quad (7.13)$$

Ces valeurs suggèrent, cette fois, que même le modèle W/HS- sous-estimerait l'hétérogénéité des moyennes interphases. Ainsi, les modèles proposés dans ce chapitre sembleraient plus indiqués que les modèles à deux transitions d'échelles pour reproduire de tels résultats.

⁹On rappellera qu'il est important de décrire tous ces contours dans le même sens, afin de sommer la contribution de chaque contour ; les formules du chapitre 5 sont liées à une description dans le sens trigonométrique.

¹⁰On pourrait, par exemple avec cette technique, envisager de quantifier l'évolution du glissement au cours du temps à l'aide d'un essai permettant de réaliser plusieurs images au cours de la sollicitation.

	ε_{DN}	ε_{DL}	ε_{DT}	$\varepsilon_{DN/DL}$	$\varepsilon_{eq.}$
Macroscopique	-31.66	26.31	5.35	5.16	34.41
Austénite* (sans glissement)	-26.24	21.83	4.40	4.11	28.50
Austénite* (avec glissement)	-26.92	23.16	3.76	4.37	29.59
Ferrite* (sans glissement)	-37.13	29.63	7.07	6.04	39.83
Ferrite* (avec glissement)	-37.96	30.97	6.38	6.33	41.00
Austénite (avec interface)	-29.80	24.68	5.12	4.84	32.35
Austénite (sans interface)	-26.94	22.43	4.51	4.46	29.31
Ferrite (avec interface)	-34.11	28.20	5.91	5.50	37.01
Ferrite (sans interface)	-35.98	29.87	6.11	5.85	39.09

TAB. 7.6: Moyennes des déformations logarithmiques mesurées sur le matériau modèle D. Les nouvelles mesures (discrétisation du contour) sont signalées par une étoile, les autres valeurs (contour reposant sur des intersections de grilles) proviennent de la table 6.5. Les valeurs sont exprimées en pourcents. Les contours utilisés entourent la phase austénitique; on a donc déduit par différence les résultats sur la phase ferritique : $\langle \underline{\underline{F}} \rangle_{\alpha} = 1/c^{\alpha} \left(\langle \underline{\underline{F}} \rangle - c^{\gamma} \langle \underline{\underline{F}} \rangle_{\gamma}^* \right)$ et $\langle \underline{\underline{F}} \rangle_{\alpha}^* = 1/c^{\alpha} \left(\langle \underline{\underline{F}} \rangle - c^{\gamma} \langle \underline{\underline{F}} \rangle_{\gamma} \right)$.

Partant des données de la table 7.5, nous pouvons quantifier l'influence du glissement à l'échelle de la micro-grille à partir de l'expression :

$$(\underline{\underline{\delta F}})_{ij} = \frac{(\underline{\underline{\Delta F}})_{ij}}{\text{Max}_{kl} |\langle \underline{\underline{F}} - \underline{\underline{I}} \rangle_{kl}|} = \frac{c^{\gamma} \left(\langle \underline{\underline{F}} \rangle_{\gamma}^* - \langle \underline{\underline{F}} \rangle_{\gamma} \right)_{ij}}{\text{Max}_{kl} |\langle \underline{\underline{F}} \rangle_{kl} - \delta_{kl}|} \quad (7.14)$$

On trouve ainsi :

$$\delta F_{DL} = 2.90\% \quad \delta F_{DN} = -0.91\% \quad \delta F_{DL/DN} = 0.53\% \quad \delta F_{DN/DL} = 0.19\% \quad (7.15)$$

Nous voyons que la contribution macroscopique du glissement dans le cas de la microstructure D à 850°C reste très modérée.

D'autres caractérisations du glissement interphase sont possibles, en considérant par exemple, la figure 7.14. Ces graphes présentent une mesure de la fluctuation par unité de surface de l'influence du glissement, en effet à partir de (7.11a) il est clair que $\underline{\underline{\Delta F}}$ peut se décomposer en une contribution pour chaque contour I de surface S^I (la surface totale de la micro-grille étant notée S), ainsi la différence $\langle \underline{\underline{F}} \rangle_{S^I}^* - \langle \underline{\underline{F}} \rangle_{S^I}$ nous fournit une estimation de la mesure désirée.

$$\underline{\underline{\Delta F}} = c^{\gamma} \left(\langle \underline{\underline{F}} \rangle_{\gamma}^* - \langle \underline{\underline{F}} \rangle_{\gamma} \right) = \sum_I \frac{S^I}{S} \left(\langle \underline{\underline{F}} \rangle_{S^I}^* - \langle \underline{\underline{F}} \rangle_{S^I} \right) = \sum_I \underline{\underline{\Delta F}}^I \quad (7.16)$$

Ce tracé permet de donner une idée des fluctuations de l'influence du glissement à une échelle plus locale. On peut enfin tracer une carte des vecteurs glissement qui représentent la différence de position à l'état déformé, du fait du glissement, de points de l'interface initialement confondus à l'état de référence. Une telle carte est reproduite figure 7.15. Cette figure nous permet de remarquer que l'intensité du glissement est loin d'être homogène et semble liée à l'orientation de l'interface. Ces observations sont confirmées par les graphes de la figure 7.16 présentant les distributions des normes¹¹ et des directions des vecteurs glissement.

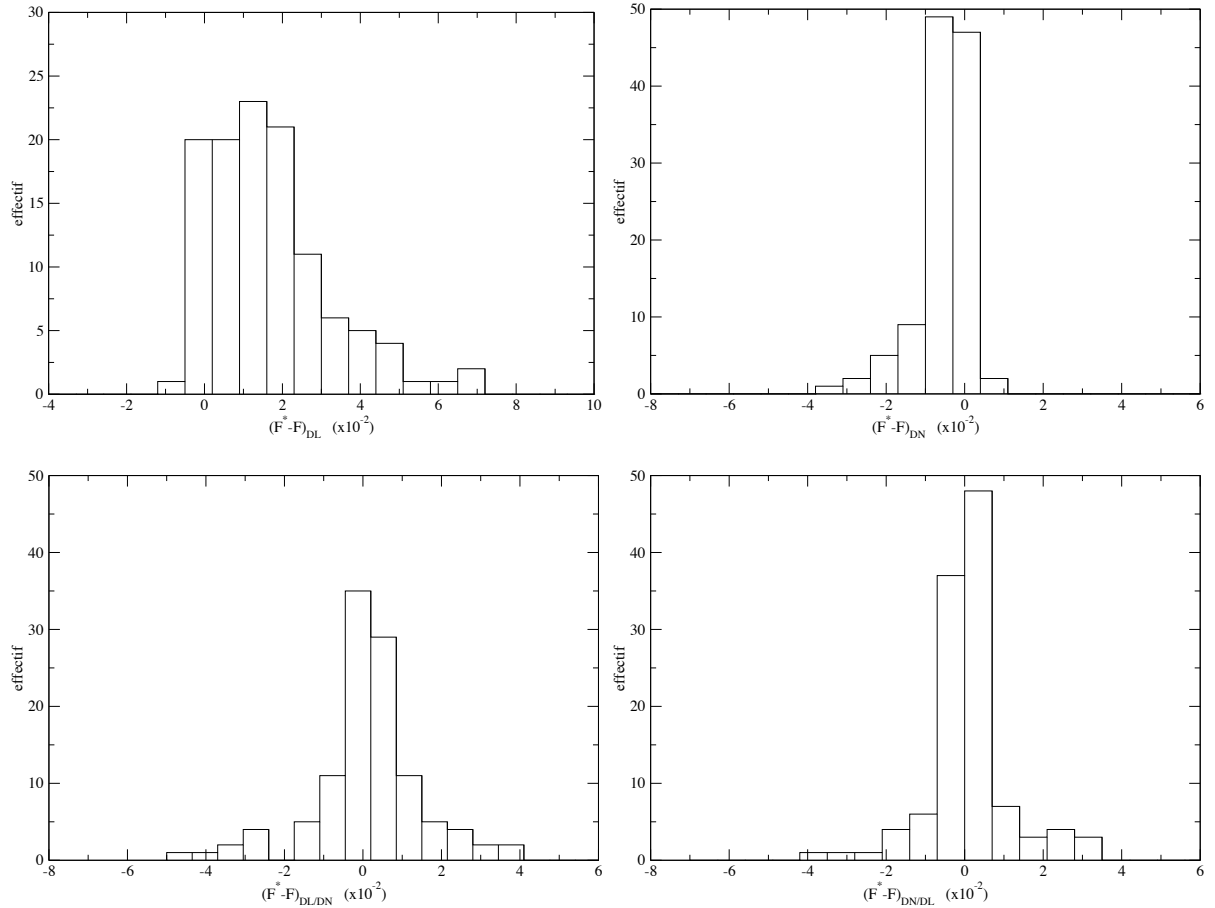


FIG. 7.14: Représentation en classes des composantes de $\langle \underline{F} \rangle_{S^I}^* - \langle \underline{F} \rangle_{S^I}$ pour l'ensemble des contours I . L'ordonnée du graphique donne le nombre d'occurrences de contour appartenant à la classe.

Une information supplémentaire peut être obtenue en superposant les figures 5.47(a) et 7.15. Il semble alors (figure 7.17) que le glissement apparaisse de façon assez marquée suivant les bandes de localisation de la déformation. Cette observation nous suggère que le glissement pourrait être un mécanisme de déformation permettant le passage de bandes de localisation dans des zones où les grains austénitiques auraient, en l'absence de ce phénomène, inhibé l'apparition ou le développement de celles-ci¹². Le mécanisme de glissement pourrait ainsi jouer un rôle de catalyseur du mode déformation localisé en bandes et influencer notablement la réponse macroscopique, même si sa contribution en termes de déformation totale reste très faible.

Si les dépouillements des données proposés ici sont assez élémentaires, l'obtention des points à l'interphase est délicate. Nous proposons dans la section suivante une procédure semi-automatique permettant de faciliter l'obtention de ces données de base.

7.2.3 Automatisation de la procédure

Nous avons vu que la discrétisation de l'interphase ferrite/austénite était réalisée en recherchant les intersections avec les barreaux horizontaux ou verticaux de la micro-grille. Le repérage automatique de ces points semble difficile, il faudrait sans doute envisager des seuillages, ou des méthodes basées sur le gradient des niveaux de gris, pour extraire la grille et l'interphase, ainsi qu'un algorithme spécifique pour déterminer les points d'intersection de ces éléments et construire les contours fermés. Nous considérons ici

¹¹ Les normes considérées dans l'histogramme 7.16(a) sont celles qui présentent une valeur supérieure à trois pixels.

¹² Ce phénomène pourrait être quantifié au travers de la recherche de corrélations entre intensité du glissement et déformation au voisinage (hors glissement).

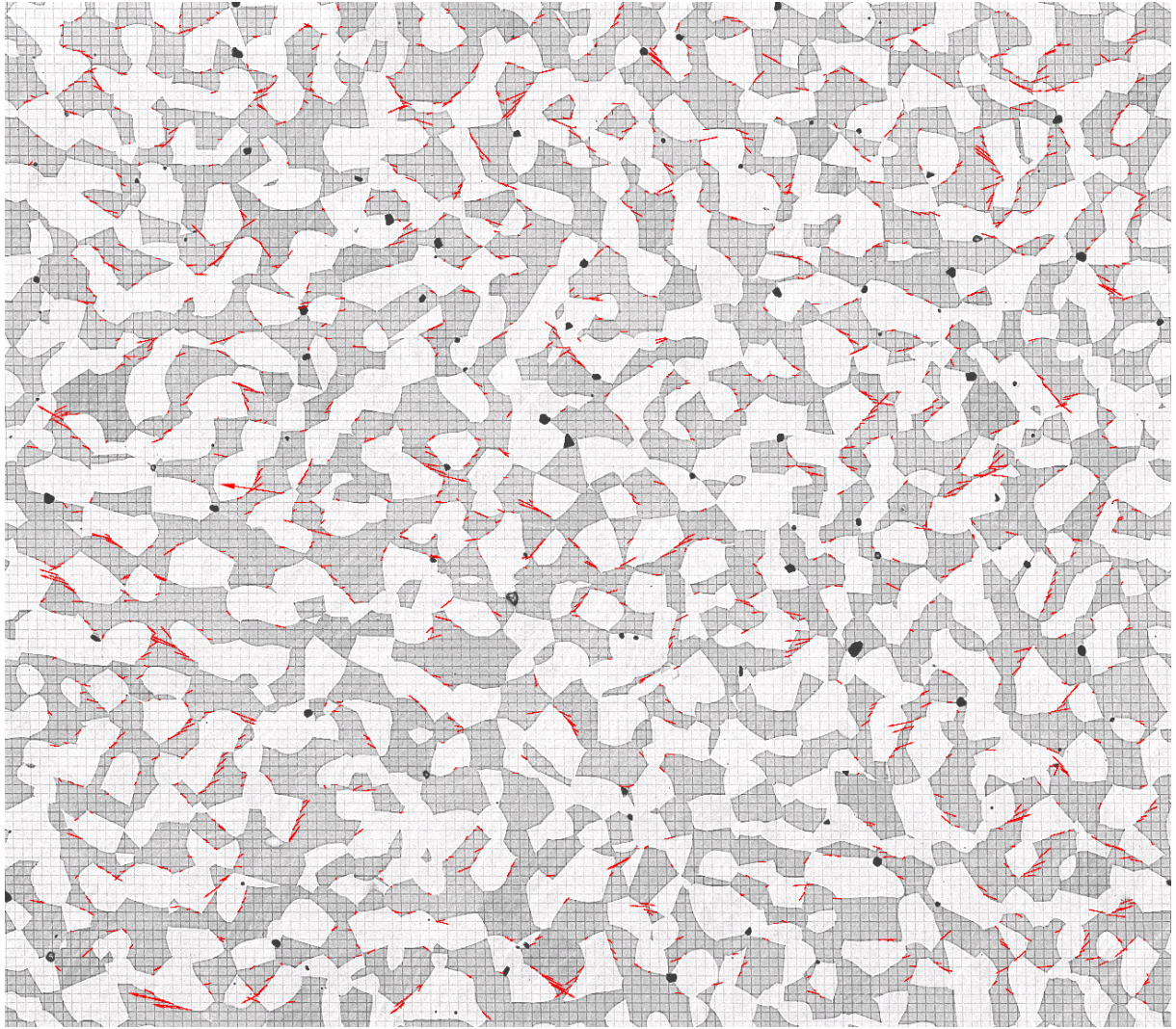


FIG. 7.15: Carte représentant le glissement interphase. Les vecteurs indiquent la direction de glissement (mouvement de la ferrite sombre par rapport à l'austénite claire) leur norme est égale à cinq fois l'amplitude du glissement, les petites valeurs de glissement ne sont pas représentées.

que cette étape est réalisée “à la main”, l’automatisation proposée dans cette section concerne la construction des deux familles de points homologues dans la configuration déformée. Le logiciel CORRELMANUV nous fournit un outil de base pour la détermination de points homologues par corrélation d’image, il s’agit donc, ici, uniquement d’adapter la technique décrite en §5.3 au cas qui nous intéresse.

Cette adaptation se base sur l’idée de réaliser la détermination des points par corrélation en ne considérant qu’une seule des deux phases. Pour ce faire, il nous faut isoler dans deux images distinctes les deux phases.

A partir des points construits sur l’image de l’état de référence, il est simple de réaliser un programme permettant de construire une image blanche sur laquelle sont représentés, en noir, les contours de phases ainsi obtenus. Cette image binaire permet d’obtenir des “masques” présentant d’une couleur différente l’intérieur et l’extérieur des contours de la phase austénitique (figure 7.18). Partant de ces masques et de l’image de référence, on peut obtenir, à l’aide d’opérateurs logiques, des images telles que celles présentées à la figure 7.19, où l’une des phases est décrite par les niveaux 0 (noir) ou 255 (blanc) d’une image 8 bits en niveaux de gris. Les domaines de phases étant approchés par des polygones issus de la discrétisation, des opérations élémentaires de morphologie mathématique [36] (érosions ou dilations) peuvent être nécessaires pour améliorer le résultat.

Une fois les phases isolées sur l’image de référence, une modification consistant à imposer au logiciel

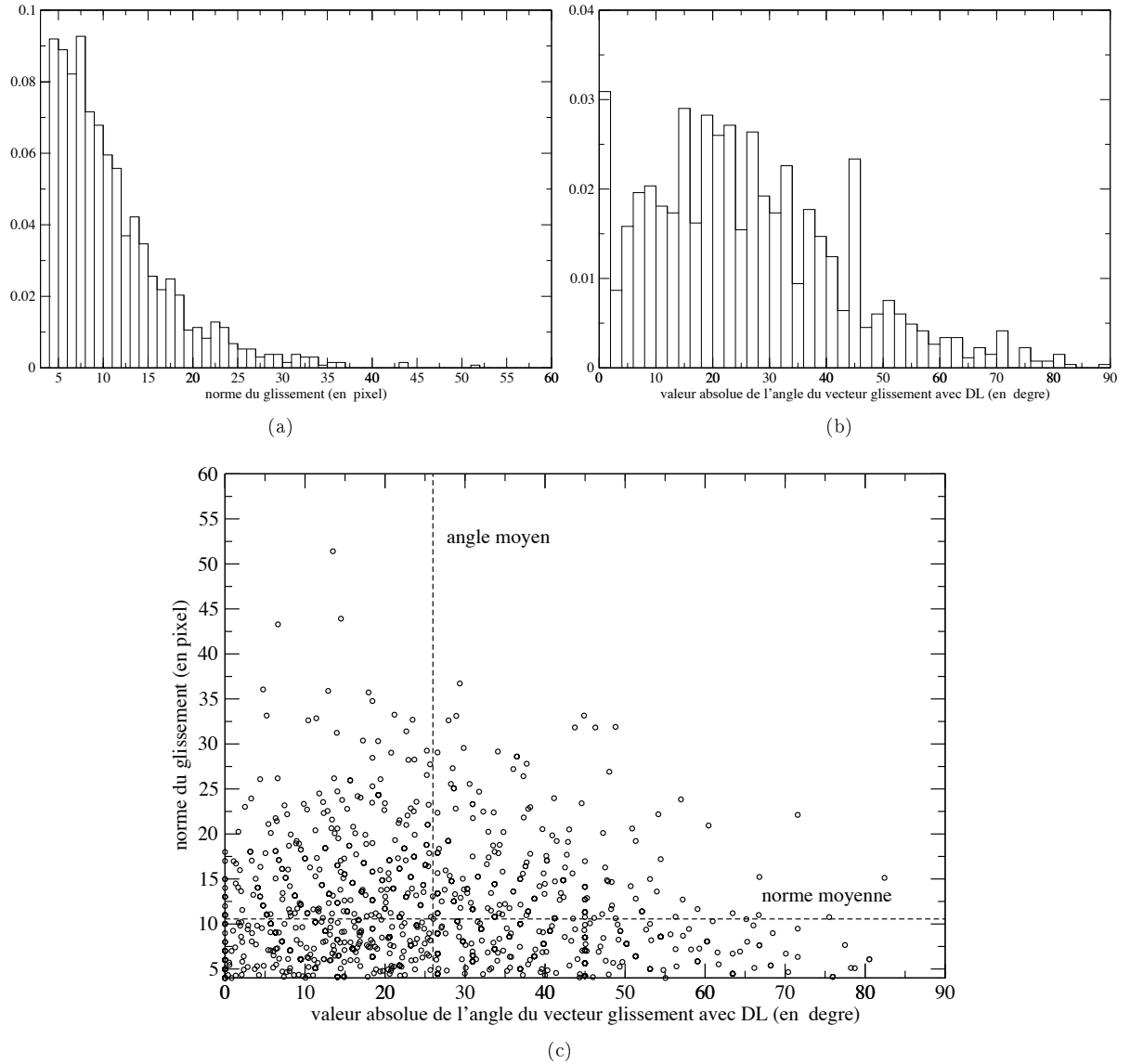


FIG. 7.16: Histogrammes et nuage de points présentant la distribution des normes et des directions du glissement dans le matériau D. Rappelons qu'un pixel correspond à $0.08\mu\text{m}$ (il n'y a pas de facteur multiplicatif ici contrairement au tracé de la figure 7.15).

CORRELMANUV de calculer les coefficients de corrélation sans prendre en compte les niveaux 0 et 255 peut permettre la détection semi-automatique¹³ des points homologues sur l'image déformée. Les points de l'interphase suivant la phase ferritique pourront ainsi être obtenus à partir de la figure 7.19(a) alors que les points de la phase austénitique se déduiront de la méthode de corrélation appliquée aux figures 7.19(b) et 5.45.

Bien que la contribution du glissement semble assez faible à l'échelle macroscopique pour le matériau sollicité à 850°C , ce phénomène pourrait jouer un rôle plus significatif à l'échelle locale, où il semble pouvoir faciliter le développement des bandes de localisation dans le matériau. Il serait donc souhaitable d'insérer ce mécanisme dans notre description de la déformation viscoplastique des polycristaux biphasés sollicités à haute température.

¹³Le terme de détection semi-automatique désigne une procédure similaire à celle proposée en §5.3, ne faisant intervenir l'utilisateur que pour des appariements points initiaux/points finaux pour lesquels le facteur de corrélation est inférieur au seuil admissible (fixé par l'utilisateur).

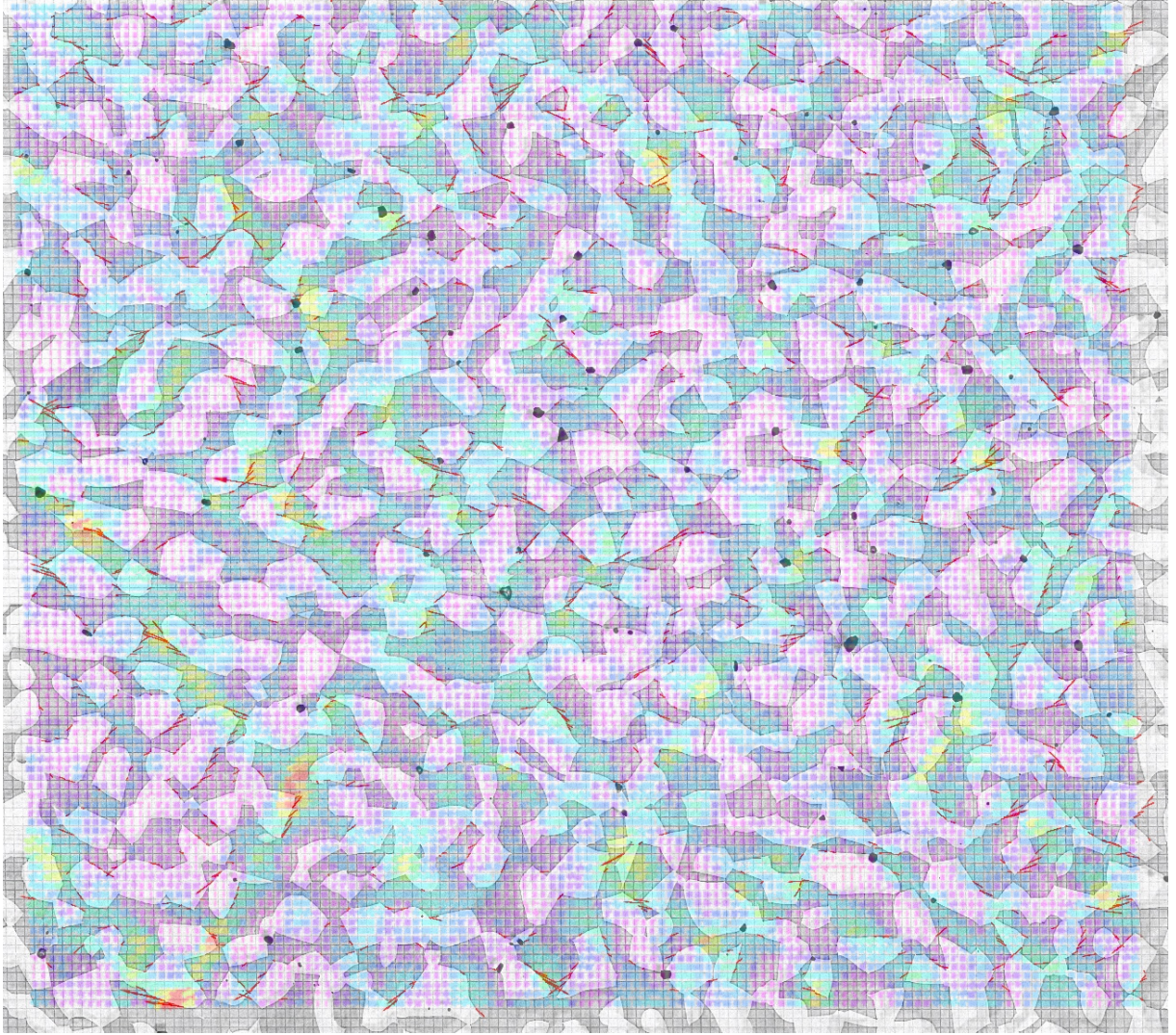
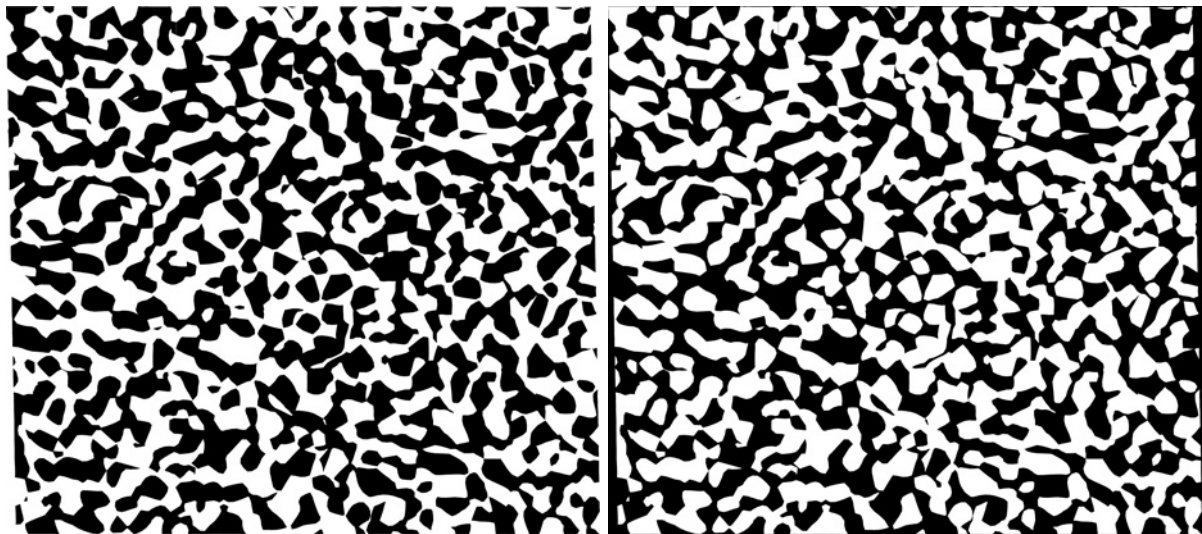


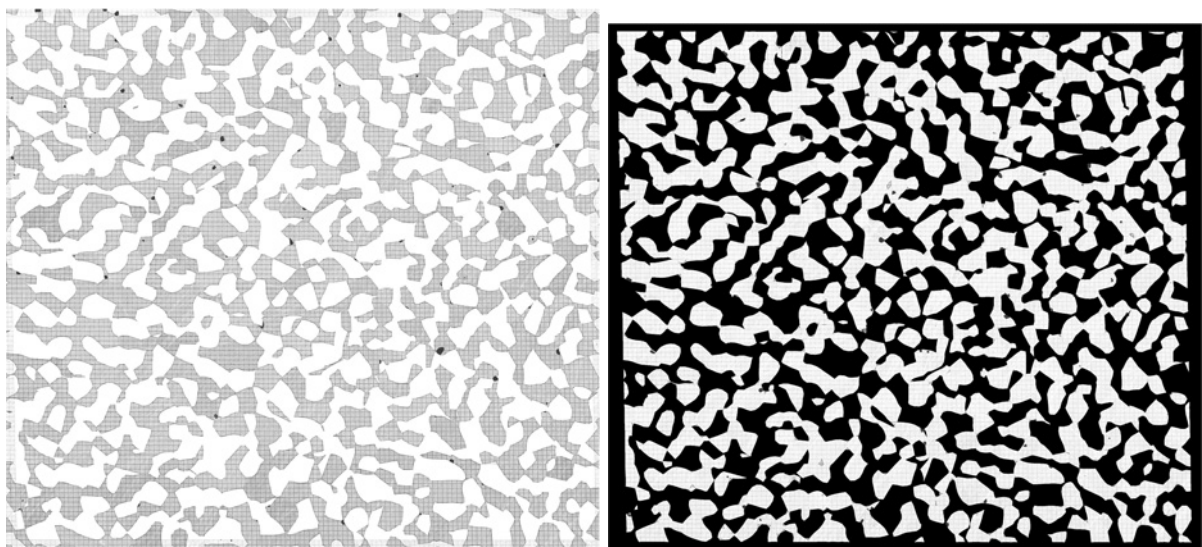
FIG. 7.17: *Superposition d'une carte des déformations équivalentes locales et d'une carte des vecteurs glissements.*

La modélisation de ce phénomène, dans le cadre de méthodes d'homogénéisation, nécessite des développements complexes qui n'ont pas pu être mis en œuvre dans le cadre de ce travail. Il est à noter que dans le cadre de la modélisation de phénomènes de glissement nos modélisations à deux transitions d'échelles peuvent se révéler intéressantes. En effet, les formulations à deux transitions d'échelles présentent l'avantage de séparer clairement les deux phases entre lesquelles apparaît principalement le glissement et intègrent un modèle de composite permettant l'assemblage de ces deux phases. Or les modèles présentés dans la littérature intégrant des discontinuités de déformation se rapportent en général aux composites biphasés. L'adaptation d'un modèle avec glissement interfacial pourrait donc se faire en substituant au modèle classique de Hashin et Shtrikman utilisé dans la formulation à deux transitions d'échelles, une modélisation de Hashin et Shtrikman modifiée telle celle de Lipton et Vernescu [113] permettant d'intégrer la contribution du glissement interphase.



(a) Masque noir pour l'austénite.

(b) Masque noir pour la ferrite.

FIG. 7.18: *Exemples de masques obtenus à partir des points du contour de la phase austénitique.*

(a) Phase ferritique isolée.

(b) Phase austénitique isolée.

FIG. 7.19: *Images de l'état non déformé isolant l'une des phases et permettant, à l'aide d'une modification du programme utilisé pour réaliser la corrélation, de ne suivre que l'une des phases dans son mouvement.*

7.3 Critique et prolongement de l'étude

Les résultats des comparaisons modèles/expériences suggèrent que notre modélisation utilisant deux transitions d'échelles couplée à l'approche variationnelle pour le traitement des non linéarités est inadaptée, en l'état, pour décrire certaines réponses à chaud observées sur les aciers inoxydables austéno-ferritiques. Les extensions proposées dans la première partie de ce chapitre visaient à fournir des alternatives au traitement précédent : en s'affranchissant de l'hypothèse de double séparation d'échelle afin de mieux appréhender l'influence de la répartition des phases sur le comportement du matériau, ou en suggérant qu'un mécanisme jouant potentiellement un rôle important n'a pas été considéré dans nos développements.

Au terme de ce travail, il nous semble pertinent de revenir sur quelques enseignements qui ont pu être tirés de ces développements en matière de caractérisation et de modélisation, mais aussi de façon plus générale en termes de démarche. Cette discussion sera divisée en deux sections : l'une traitant plus spécifiquement de modélisation et l'autre d'expérimentation.

7.3.1 Cadre théorique

C'est avec l'idée qu'un modèle auto-cohérent pouvait se révéler trop restrictif pour décrire la complexité et la variabilité d'une microstructure polycristalline biphasée que nous avons abordé le problème de la déformation à chaud des aciers inoxydables austéno-ferritiques. L'observation de résultats expérimentaux semblant se distinguer fortement de situations classiques (courbes d'écoulement macroscopiques proches de celles du constituant le plus mou, différences importantes des champs locaux pour deux configurations microstructurales) a suggéré l'existence d'un fort effet de répartition des phases dans le matériau biphasé. L'objectif de notre travail était de tester l'hypothèse selon laquelle ce serait ce paramètre qui influencerait principalement sur la réponse du matériau. Ainsi, en intégrant dans un modèle polycristallin une description proche de celle utilisée dans le cadre de matériaux composites, nous avons développé un modèle simple mettant en avant l'aspect biphasé du matériau. Celui-ci permet d'évaluer la gamme des comportements possibles et réalistes liés à la variabilité potentielle de la répartition des phases. Cette démarche, sans définir de bornes rigoureuses, a permis de proposer un "faisceau des possibles" pour le comportement des polycristaux biphasés non linéaires dont l'agencement des phases est incertain. Ce résultat constitue une originalité notable dans le cadre des écoulements non linéaires.

Ce modèle nous a paru être un prolongement intéressant de la formulation auto-cohérente, caractéristique d'une morphologie spécifique, du fait des différences marquées qui ont pu être observées entre ces modélisations sur des cas tests.

Néanmoins, l'application du modèle aux situations expérimentales a révélé une tendance correcte mais insuffisante pour le niveau de contraste interphase intervenant dans le matériau¹⁴ considéré. Le modèle à une transition d'échelle introduit dans ce dernier chapitre semble permettre d'éviter cet écueil et mériterait une étude plus approfondie afin de confirmer les tendances encourageantes qui ont été révélées.

Dans cette section, nous allons discuter de façon critique les hypothèses sous-jacentes à nos modélisations afin d'ouvrir des perspectives d'amélioration pour des développements futurs.

La première critique que nous pouvons formuler est liée au caractère très simplifié des modèles d'homogénéisation. En effet, ces modèles fournissent une description en "champs moyens" présentant de façon simplifiée, par rapport à la réalité mais aussi par rapport à d'autres techniques de simulation, la microstructure et les champs mécaniques au sein du matériau ainsi que les interactions et les évolutions de ses constituants.

A titre d'illustration, dans notre cas nous manipulons des familles d'orientations et non des monocristaux se déformant, tournant et s'écrouissant de façon individuelle. Plusieurs extensions ont été suggérées à ce sujet au fil du texte, mais il est difficile de caractériser la criticité de ces simplifications sans recourir à la comparaison aux résultats de simulations en "champs complets" (éléments finis, méthodes de transformées de Fourier...) permettant de se placer dans des conditions similaires en termes de comportement, de méthodes de traitement (algorithmie, linéarisation, discrétisation temporelle) et parfois pour des cas simples en termes de microstructure. C'est à ce titre et afin d'éviter les incertitudes liées à l'expérimentation que de nombreux auteurs [169, 118, 102, 85] considèrent plutôt des comparaisons champs complets/champs moyens avant de songer à comparer modèles et expériences. Il serait également souhaitable, dans notre

¹⁴On peut se poser la question de la pertinence de ces descriptions dans le cadre de biphasés plus contrastés tel que le titane [101, 9].

cas, d'ajouter une telle composante à notre démarche. C'est à la fois notre volonté de comparer ces modèles à l'application pratique qui pourrait en être faite, et la conviction qu'un phénomène marqué lié à l'agencement des phases pouvait expliquer simplement les observations qui nous ont incité à nous lancer dans de telles confrontations.

L'observation précédente devient critique lorsque des phénomènes de localisation interviennent dans les situations expérimentales que nous cherchons à reproduire. En effet, le traitement "en moyenne" limite certainement l'hétérogénéité des prévisions interphases dans le cadre du modèle W/HS-. Comme précédemment, les simulations en champs complets ne souffrent pas de ce défaut et pourraient donc être plus adaptées à la description de champs localisés.

Nous avons vu néanmoins à travers la méthode alternative proposée dans ce chapitre qu'il était possible de "forcer" la localisation de la déformation en utilisant un modèle d'homogénéisation adapté. Cette formulation présente des résultats très encourageants et repose sur l'introduction d'un paramètre quantifiant l'importance de cette localisation. L'existence d'un tel paramètre nous permet, une fois encore, de proposer un domaine de fluctuation probable pour le comportement des polycristaux non linéaires présentant une distribution de la déformation induite par la répartition des phases. De plus, ce paramètre est susceptible d'être relié à une mesure expérimentale relative à la connexité des zones fortement déformées. Ce modèle étant simple et proche dans sa description des observations expérimentales de nombreuses variantes peuvent être suggérées, ce qui constitue une source de richesse pour un domaine où l'emploi de la formulation auto-cohérente était quasiment exclusif.

La grande simplicité des modèles d'homogénéisation fait à la fois leur faiblesse et leur force, en effet bien que nous ayons fait référence à des méthodes numériques en champs complets en vue de prolonger l'étude menée ici, il est à noter que ces techniques sont bien plus lourdes à mettre en œuvre. Ainsi, si elles peuvent potentiellement permettre d'évaluer la pertinence des modèles d'homogénéisation sous certaines conditions, il semble difficile d'imaginer quantifier l'influence de la répartition des phases à l'aide d'une telle méthode car plusieurs difficultés se posent alors.

La première est liée à la représentation du matériau. Si l'homogénéisation fournit un cadre statistique par construction pour la modélisation des matériaux, les simulations en champs complets sont par essence déterministes. Elles nécessitent donc de disposer d'un outil performant pour la construction de microstructures réalistes vis-à-vis du matériau à traiter. En outre, dans le cadre de l'application visée, il serait nécessaire que cet outil permette également de générer des microstructures présentant des distributions de phase variées mais statistiquement équivalentes par ailleurs. En supposant qu'un tel outil soit disponible, il faut ensuite réaliser des calculs sur un VER de ce matériau virtuel. Un VER dans un matériau polycristallin de comportement fortement non linéaire peut comprendre plusieurs milliers de grains ce qui dépasse la capacité actuelle des simulations polycristallines. Il faut donc se résoudre à travailler sur des éléments microstructuraux d'extension généralement bien inférieure à celle d'un volume représentatif, il se pose alors la question des conditions aux limites à imposer à un tel élément. On peut faire le choix de considérer des conditions homogènes au bord et essayer de caractériser la vitesse de convergence du comportement vis-à-vis de l'extension du sous-domaine. Il est également possible d'imaginer imposer des conditions périodiques ou même inspirées de mesures expérimentales afin de limiter ce biais mais ces techniques restent lourdes et complexes dans leur mise en œuvre. De plus, l'extension du domaine de calcul étant inférieure à la taille d'un VER, il est nécessaire de réaliser un grand nombre de simulations sur réalisations distinctes afin d'espérer approcher, à l'aide d'un traitement statistique, la diversité des réponses apparaissant dans un VER. À ces difficultés, il faudrait également ajouter la nécessité de travailler dans un cadre fortement non linéaire en grandes transformations et ainsi gérer des évolutions microstructurales importantes avec les difficultés numériques que cela comporte. Les méthodes d'homogénéisation gardent ainsi leur pertinence au vu de la complexité de cette démarche.

Nous pouvons également reprocher au modèle le caractère souvent trop raide et trop homogène de nos prédictions en présence d'un faible contraste. Cette observation suggère que le choix de la formulation variationnelle de Ponte Castañeda n'est peut être pas le plus judicieux. En effet, nous avons rappelé aux chapitres 2 et 3 que ce modèle constituait une borne supérieure pour le comportement instantané du matériau, à modèle d'homogénéisation linéaire donné. De plus, nous avons constaté que cette linéarisation conduisait à des résultats proches de ceux du modèle de Taylor pour les fortes non linéarités (figures 4.10 et 4.11 par exemple) donc très peu sensibles à la répartition des constituants. La raideur inhérente

à ce modèle pourrait donc être responsable de l'incapacité du modèle W/HS- à rendre compte de l'effet d'adoucissement lié à la distribution des phases dans les conditions de contraste considérées par Brown [27].

Nous pourrions substituer à ce modèle une formulation de type SO afin de tester cette hypothèse¹⁵. Néanmoins, l'implémentation de ce type de modèle est complexe et le temps de développement risque d'être important. Une première tentative nous a montré la difficulté d'obtention d'un algorithme stable permettant la résolution du problème non linéaire. En effet, rappelons que dans le cas des modèles du second ordre la linéarisation ne fait plus intervenir la minimisation d'une fonction convexe, mais la résolution d'un système d'équations non linéaires (voir [115] par exemple), ce qui est bien plus complexe. Les difficultés d'implémentation d'une telle méthode justifient de s'être intéressé en priorité à la formulation variationnelle qui est mieux connue et dont la forme est aujourd'hui figée, ce qui n'est pas tout à fait le cas des méthodes SO. Néanmoins le traitement numérique de ce modèle a connu des développements récents et on pourrait aujourd'hui s'inspirer de l'implémentation de cette formulation dans VPSC réalisée par Lebensohn afin de l'adapter dans le cadre des modèles qui ont été proposés dans ce travail.

7.3.2 Cadre expérimental

Les données expérimentales utilisées dans ce travail jettent un voile d'incertitude sur nos confrontations modèles/expériences. En effet, les résultats ayant été obtenus pour des matériaux différents, il est difficile, voire impossible, de savoir si ce qui apparaît à l'échelle locale sur le matériau D est révélateur des mécanismes présents dans les matériaux de Brown.

Des efforts importants ont été consacrés à réduire l'incertitude liée aux conditions expérimentales, en corrigeant la température et en faisant varier les paramètres microstructuraux tels la texture ou la symétrie de répartition des phases. Cependant la caractérisation multi-échelle d'un même matériau clarifierait notablement le rôle que l'on peut attribuer aux diverses caractéristiques des champs locaux identifiées au cours de ce travail (développement de bandes de localisation, hétérogénéité de déformation interphase, glissement interfacial). Cette tâche était initialement l'objectif visé par la partie expérimentale de ce travail mais les difficultés de mise en œuvre des techniques utilisées par rapport au temps disponible dans le cadre d'un échange de quelques mois n'ont pas permis d'atteindre pleinement ce but. De nouvelles études devront donc s'efforcer de conserver un même matériau pour réaliser, par exemple, les différentes caractérisations proposées au chapitre 5.

Cet impératif étant posé, et connaissant les difficultés de mise en place des mesures à l'échelle locale, il est nécessaire de commencer par réaliser des caractérisations macroscopiques dans des conditions de sollicitation diverses afin de déterminer un cas de réponse particulièrement caractéristique d'un "effet de distribution des phases", telle une déformation proche de celle du matériau ferritique en présence d'un biphasé riche en austénite. Si un tel essai macroscopique peut être obtenu de façon reproductible, nous pouvons envisager de l'utiliser dans le cadre d'une caractérisation multi-échelle afin d'avoir en notre possession la majeure partie des données du problème.

Une autre incertitude provient de la connaissance du comportement des phases pures. La réalisation de matériaux monophasés de même composition que les constituants du biphasé semble être une tâche difficile. Il serait peut être bon de chercher une alternative pour l'identification du comportement des constituants, par exemple, en utilisant une approche inverse sur un ensemble de matériaux biphasés ou en mettant en œuvre des techniques d'identification basées sur des mesures locales [71, 47].

Seule l'obtention de données fiables concernant le comportement des constituants, la microstructure et les mécanismes apparaissant au sein du matériau biphasé ainsi que sa réponse aux différentes échelles, nous permettraient de formuler une conclusion plus nette concernant la qualité des modèles proposés dans ce travail.

¹⁵Nous pouvons imaginer par exemple tracer un diagramme homologue à ceux fournis en figure 7.3.

Conclusion

Le point de départ de ce travail est le constat que les aciers austéno-ferritiques présentent des spécificités qui rendent leur mise en forme difficile dans un contexte industriel. Cette difficulté est en général considérée comme étant liée à l'aspect biphasé du matériau et en particulier à l'agencement de ses phases. Il nous a semblé pertinent d'essayer de clarifier les raisons qui pourraient expliquer un tel phénomène. Dans ce but, nous avons tout d'abord fait un point rapide sur quelques caractéristiques des aciers inoxydables austéno-ferritiques disponibles dans la littérature et sur les méthodes générales permettant de simuler la réponse de ces matériaux.

Ayant fait le choix d'une approche par homogénéisation, nous avons constaté l'absence de modèle permettant de quantifier l'influence de la répartition des phases pour un polycristal biphasé. Nous avons donc proposé un modèle, basé sur la formulation variationnelle de Ponte Castañeda, intégrant deux transitions d'échelles, et censé permettre de modéliser des agencements "extrêmes" des deux phases en vue de quantifier l'influence de ce paramètre microstructural sur la réponse du matériau. L'implémentation de ce modèle a été réalisée et des situations tests ont été envisagées afin de valider cette dernière et de caractériser les situations pour lesquelles un effet de répartition des phases est attendu. Ces premiers résultats montrent que le contraste et la non linéarité jouent un rôle important dans l'apparition d'un effet de répartition des phases.

Signalons également que cette démarche constitue une première tentative d'estimation de l'influence mécanique d'une variabilité microstructurale difficile à contrôler et à caractériser précisément.

Afin de confronter notre modélisation à une situation réelle, nous avons considéré des résultats expérimentaux obtenus en collaboration avec l'université de Sheffield. Bien que les données expérimentales rassemblées soient partielles, nous avons pu définir des procédures permettant d'obtenir les données d'entrée nécessaires à notre modélisation et des informations pertinentes pour la comparaison avec les résultats issus de la simulation. L'extraction de ces informations étant faite, des comparaisons modèle/expérience ont pu être réalisées. Celles-ci montrent que le contraste interphase est trop faible pour que la modélisation à deux transitions d'échelles puisse reproduire les tendances observées à l'échelle macroscopique. Elles montrent également que les différentes modélisations envisagées prévoient des ordres de grandeur cohérents pour la déformation moyenne par phase à l'échelle locale et que la formulation à deux transitions d'échelles peut parfois présenter une variabilité notable pour des situations de contraste suffisant par rapport au modèle auto-cohérent classique. Les évolutions de microstructure prévues par les modèles semblent également conformes aux observations expérimentales.

Ainsi, bien qu'un effet de répartition des phases soit suggéré par les résultats expérimentaux, les faibles différences de comportement existant entre les deux phases semblent inhiber la prévision d'un tel effet.

Nous remettons donc en question notre formulation à deux transitions d'échelles pour l'application présente et proposons, à titre d'ouverture, un autre modèle susceptible d'être plus adapté à la description du phénomène de localisation qui semble être révélé par les mesures locales à notre disposition. Cette nouvelle modélisation, simple et basée sur l'adaptation de formulations classiques, permet de prévoir des hétérogénéités plus importantes à l'échelle locale et semble être plus adaptée en termes de fluctuations intra-orientation. En outre, elle permet d'obtenir des écoulements macroscopiques assez proches des données expérimentales et cela même pour un contraste faible entre les phases. Ce modèle est donc très encourageant et mériterait d'être étudié plus en détail. Néanmoins, les paramètres nécessaires pour reproduire les écoulements macroscopiques semblent peu physiques, car la localisation nécessaire à un tel adoucissement est très importante. Cette observation suggère que d'autres mécanismes pourraient

contribuer à ce phénomène.

L'exemple d'un tel mécanisme a été rencontré au cours de nos investigations à l'échelle locale, il s'agit de glissement interphase. Bien que ce phénomène ait déjà été relevé dans la littérature, peu d'études se sont attachées à quantifier l'importance de sa contribution. Nous avons proposé ici une méthode originale permettant une telle caractérisation. Celle-ci a permis de montrer que ce phénomène contribuait faiblement, en lui-même, à la déformation macroscopique. Mais que, par ailleurs, celui-ci pouvait probablement favoriser la localisation de la déformation dans le matériau et ainsi peut-être justifier partiellement l'utilisation de paramètres a priori peu physiques dans notre modèle "avec localisation".

Comme nous l'avons souligné dans la discussion du dernier chapitre, il serait nécessaire d'obtenir des caractérisations expérimentales multi-échelles sur un même matériau pour traiter, avec certitude, des données locales et macroscopiques en accord les unes avec les autres. Il serait également intéressant de valider les résultats de nos modèles au travers de modélisations en champs complets (dans des cas particuliers simples où ces derniers peuvent être réalisés pour un coût numérique raisonnable) afin de s'assurer que la prévision de l'influence de la répartition des phases est bien représentée par nos formulations. Par ailleurs, la technique de linéarisation employée pourrait être inadaptée, ainsi une implémentation dans le cadre d'une approche au second ordre devrait être envisagée.

Annexe A

Quelques résultats simples concernant les polycristaux cubiques linéaires

Cette annexe présente quelques résultats sur les matériaux de structure cubique dont font partie l'austénite et la ferrite étudiées dans ce travail. Nous présenterons dans un premier temps des solutions analytiques pour l'homogénéisation de polycristaux linéaires à texture isotrope, qui nous serviront de validations élémentaires pour nos simulations. Puis nous vérifierons une propriété surprenante de ces structures cristallines à savoir la nullité de leur rotation plastique.

A.1 Quelques solutions analytiques

Dans le cadre linéaire le comportement d'un monocristal prend la forme proposée en (2.69). En supposant tous les systèmes de même dureté¹ et en considérant respectivement les douze et vingt-quatre systèmes des phases CFC et CC, on peut montrer que les tenseurs de "raideur" et de "souplesse"² s'écrivent (A.1) dans le repère cristallographique $\langle 100 \rangle$ (où les \underline{e}_i désignent les vecteurs de cette base).

$$\mathbb{S}_{\text{CFC}}^{(r)} = \sum_k A \underline{\underline{\mu}}_{(k)}^{(r)} \otimes \underline{\underline{\mu}}_{(k)}^{(r)} \quad \mathbb{S}_{\text{CC}}^{(r)} = \sum_{\text{système 1}} B \underline{\underline{\mu}}_{(k)}^{(r)} \otimes \underline{\underline{\mu}}_{(k)}^{(r)} + \sum_{\text{système 2}} B' \underline{\underline{\mu}}_{(k)}^{(r)} \otimes \underline{\underline{\mu}}_{(k)}^{(r)} \quad (\text{A.1a})$$

$$= 2A \mathbb{K}_a + \frac{2A}{3} \mathbb{K}_b \quad = 2(B + B') \mathbb{K}_a + \frac{2}{3}(B + B') \mathbb{K}_b \quad (\text{A.1b})$$

$$\mathbb{C}_{\text{CFC}}^{(r)} = \frac{1}{2A} \mathbb{K}_a + \frac{3}{2A} \mathbb{K}_b \quad \mathbb{C}_{\text{CC}}^{(r)} = \frac{1}{2(B + B')} \mathbb{K}_a + \frac{3}{2(B + B')} \mathbb{K}_b \quad (\text{A.1c})$$

$$\mu_a^{\text{CFC}} = \frac{1}{4A}; \mu_b^{\text{CFC}} = \frac{3}{4A} \quad \mu_a^{\text{CC}} = \frac{1}{4(B + B')}; \mu_b^{\text{CC}} = \frac{3}{4(B + B')} \quad (\text{A.1d})$$

où $\mathbb{K}_a = \Phi - \mathbb{J}$ et $\mathbb{K}_b = \mathbb{I} - \Phi$ avec $\Phi = \sum_i \underline{e}_i \otimes \underline{e}_i \otimes \underline{e}_i \otimes \underline{e}_i$. Or, pour un polycristal à texture isotrope, on peut exprimer $\langle \mathbb{K}_a \rangle$ et $\langle \mathbb{K}_b \rangle$. En effet, si toutes les orientations sont équiprobables, alors $\langle \Phi \rangle$ est isotrope et s'écrit $3 \langle \underline{n} \otimes \underline{n} \otimes \underline{n} \otimes \underline{n} \rangle$, où \underline{n} sont des vecteurs décrivant de façon uniforme la sphère unité. L'intégration sur la sphère donne : $\langle n_i n_i n_j n_j \rangle = \langle n_i n_j n_i n_j \rangle = 1$, ainsi :

$$\langle \Phi \rangle = \frac{\langle \Phi \rangle :: \mathbb{J}}{\mathbb{J} :: \mathbb{J}} \mathbb{J} + \frac{\langle \Phi \rangle :: \mathbb{K}}{\mathbb{K} :: \mathbb{K}} \mathbb{K} = \mathbb{J} + \frac{2}{5} \mathbb{K} \quad (\text{A.2})$$

On obtient donc $\langle \mathbb{K}_a \rangle = 2/5 \mathbb{K}$ et $\langle \mathbb{K}_b \rangle = 3/5 \mathbb{K}$. Ces relations vont nous permettre de déduire des résultats analytiques pour certains cas présentés au chapitre 4. Nous nous concentrerons uniquement ici sur les relations permettant des comparaisons directes avec les figures de ce chapitre.

¹Ce qui est vérifié au début de la simulation ou en l'absence d'écrouissage. On notera $A = 2\alpha_{(k)}^{(r)}$ dans le cas CFC, et $B = 2\alpha_{(k)}^{(r)}$ et $B' = 2\alpha_{(k)}^{(r)}$ pour chacun des deux systèmes de la structure CC.

²Il ne s'agit pas de tenseurs d'élasticité à proprement parler car nous travaillons en viscoplasticité, néanmoins le §2.2.1 nous autorise cette analogie. De même nous utiliserons les notations \mathbb{C} et \mathbb{S} par analogie avec l'élasticité linéaire.

A.1.1 Polycristaux monophasés

Les bornes élémentaires de Voigt et Reuss s'écrivent :

$$\tilde{\mathbb{C}}^V = \langle \mathbb{C} \rangle^{(r)} = 2\mu_a^\varphi \langle \mathbb{K}_a \rangle + 2\mu_b^\varphi \langle \mathbb{K}_b \rangle = 2 \left[\frac{2\mu_a^\varphi}{5} + \frac{3\mu_b^\varphi}{5} \right] \mathbb{K} = 2\tilde{\mu}^V \mathbb{K} \quad (\text{A.3a})$$

$$\tilde{\mathbb{C}}^R = \left\langle \left(\mathbb{C}^{(r)} \right)^{-1} \right\rangle^{-1} = \left[\frac{1}{2\mu_a^\varphi} \langle \mathbb{K}_a \rangle + \frac{1}{2\mu_b^\varphi} \langle \mathbb{K}_b \rangle \right]^{-1} = \left[\frac{2\mu_b^\varphi + 3\mu_a^\varphi}{10\mu_a^\varphi \mu_b^\varphi} \right]^{-1} \mathbb{K} = 2\tilde{\mu}^R \mathbb{K} \quad (\text{A.3b})$$

$$(\text{A.3c})$$

où φ désigne l'une des deux phases. On obtient ainsi, dans le cas du matériau CFC³ avec $A = 1$, un module de Voigt de 11/20 et un module de Reuss de 5/12. On rappelle le lien simple qui existe dans le cas d'un comportement isotrope incompressible entre les contraintes équivalentes et les taux de déformation équivalents :

$$\underline{\underline{\Sigma}} = 2\tilde{\mu} \mathbb{K} : \underline{\underline{\dot{E}}} \Rightarrow \Sigma_{\text{eq.}} = \sqrt{\frac{3}{2} 4\tilde{\mu}^2 \left(\mathbb{K} : \underline{\underline{\dot{E}}} \right)} = 3\tilde{\mu} \dot{E}_{\text{eq.}} \quad (\text{A.4})$$

Cette expression permet de comparer les résultats précédents aux premiers points des graphes des figures 4.1, 4.8 ou 4.9. Dans le cas des bornes de Hashin et Shtrikman⁴, il est nécessaire d'introduire un comportement de référence \mathbb{C}^0 et le tenseur d'influence de Hill \mathbb{C}^* (la distribution des orientations étant supposée isotrope) :

$$\mathbb{C}^0 = 3k^0 \mathbb{J} + 2\mu^0 \mathbb{K} \quad (\text{A.5a})$$

$$\mathbb{C}^* = 4\mu^0 \mathbb{J} + \frac{\mu^0}{3} \frac{9k^0 + 8\mu^0}{k^0 + 2\mu^0} \mathbb{K} \quad \mathbb{S}^* = \frac{1}{4\mu^0} \mathbb{J} + \frac{3}{\mu^0} \frac{k^0 + 2\mu^0}{9k^0 + 8\mu^0} \mathbb{K} \quad (\text{A.5b})$$

Dans le cadre des matériaux incompressibles, nous pouvons considérer les expressions obtenues pour $k^0 \rightarrow +\infty$ en nous restreignant au sous-espace des déviateurs :

$$\mathbb{C}^* = 3\mu^0 \mathbb{K} \quad \mathbb{S}^* = \frac{1}{3\mu^0} \mathbb{K} \quad (\text{A.6})$$

Les tenseurs effectifs et de localisation de Hashin et Shtrikman s'expriment par :

$$\tilde{\mathbb{C}}^{\text{HS}} + \mathbb{C}^* = \left\langle \left[\mathbb{C}^{(r)} + \mathbb{C}^* \right]^{-1} \right\rangle^{-1} \quad \tilde{\mathbb{S}}^{\text{HS}} + \mathbb{S}^* = \left\langle \left[\mathbb{S}^{(r)} + \mathbb{S}^* \right]^{-1} \right\rangle^{-1} \quad (\text{A.7a})$$

$$\mathbb{A}_{(r)}^{\text{HS}} = \left(\mathbb{C}^* + \mathbb{C}^{(r)} \right)^{-1} : \left(\mathbb{C}^* + \mathbb{C}^{\text{HS}} \right) \quad \mathbb{B}_{(r)}^{\text{HS}} = \left(\mathbb{S}^* + \mathbb{S}^{(r)} \right)^{-1} : \left(\mathbb{S}^* + \mathbb{S}^{\text{HS}} \right) \quad (\text{A.7b})$$

On peut, à partir de ces relations, obtenir le module effectif du modèle de Hashin et Shtrikman en fonction du comportement de référence, en explicitant :

$$\left\langle \left[\mathbb{S}^{(r)} + \mathbb{S}^* \right]^{-1} \right\rangle^{-1} = \left\langle \left[\frac{1}{2\mu_a^\varphi} \mathbb{K}_a + \frac{1}{2\mu_b^\varphi} \mathbb{K}_b + \frac{1}{3\mu^0} (\mathbb{K}_a + \mathbb{K}_b) \right]^{-1} \right\rangle^{-1} \quad (\text{A.8a})$$

$$= \left[\frac{2}{5} \left(\frac{1}{2\mu_a^\varphi} + \frac{1}{3\mu^0} \right)^{-1} + \frac{3}{5} \left(\frac{1}{2\mu_b^\varphi} + \frac{1}{3\mu^0} \right)^{-1} \right]^{-1} \quad (\text{A.8b})$$

et

$$\tilde{\mathbb{S}}^{\text{HS}} + \mathbb{S}^* = \frac{1}{2\tilde{\mu}^{\text{HS}}} \mathbb{K} + \frac{1}{3\mu^0} \mathbb{K} \quad (\text{A.9})$$

On obtient donc :

$$\tilde{\mu}^{\text{HS}}(\mu^0) = \frac{1 + \frac{9\mu^0}{10\mu_a^\varphi} + \frac{3\mu^0}{5\mu_b^\varphi}}{\frac{2}{5\mu_a^\varphi} + \frac{3}{5\mu_b^\varphi} + \frac{3\mu^0}{2\mu_a^\varphi \mu_b^\varphi}} \quad (\text{A.10})$$

³Les résultats pour la phase CC avec $B = B' = A$ s'obtiennent, par linéarité, en divisant par deux les valeurs trouvées pour le polycristal CFC.

⁴Ces développements sont également présentés dans [22].

Cette expression permet de retrouver les bornes de Voigt et Reuss pour respectivement $\mu^0 \rightarrow +\infty$ et pour $\mu^0 = 0$. On pourrait obtenir la borne inférieure de Hashin et Shtrikman en considérant $\mu^0 = \mu_a^\varphi$, car $\mu_a^\varphi \leq \mu_b^\varphi$, ou la borne supérieure pour $\mu^0 = \mu_b^\varphi$.

Mais, cherchant à valider les résultats du chapitre 4 nous nous intéresserons plutôt au comportement effectif dans le cas du modèle auto-cohérent :

$$\tilde{\mu}^{\text{SC}} = \frac{1 + \frac{9\tilde{\mu}^{\text{SC}}}{10\mu_a^\varphi} + \frac{3\tilde{\mu}^{\text{SC}}}{5\mu_b^\varphi}}{\frac{2}{5\mu_a^\varphi} + \frac{3}{5\mu_b^\varphi} + \frac{3\tilde{\mu}^{\text{SC}}}{2\mu_a^\varphi\mu_b^\varphi}} \Rightarrow 3(\tilde{\mu}^{\text{SC}})^2 - \mu_b^\varphi\tilde{\mu}^{\text{SC}} - 2\mu_a^\varphi\mu_b^\varphi = 0 \quad (\text{A.11a})$$

$$\Rightarrow \tilde{\mu}^{\text{SC}} = \frac{1}{6} \left[\mu_b^\varphi + \sqrt{(\mu_b^\varphi)^2 + 24\mu_a^\varphi\mu_b^\varphi} \right] \quad (\text{A.11b})$$

Ce qui se simplifie en $1/2A$ dans le cas CFC et conduit donc à un module auto-cohérent de un demi lorsque $A = 1$, ce qui est cohérent avec les résultats des figures 4.1, 4.8 et 4.9.

Notons que nous pourrions exprimer la moyenne des contraintes ou des taux de déformation pour une orientation donnée à partir des relations de localisation (A.7b).

Le calcul des seconds moments au sein des cristaux de même orientation, quant à lui, est beaucoup plus délicat et nous n'avons pas trouvé de formulation purement analytique pour y parvenir. Cette difficulté est liée à la perte d'isotropie du comportement effectif lors de la perturbation du comportement d'un des monocristaux (voir §2.2.2.g ou §3.4.2).

A.1.2 Polycristaux biphasés

Dans cette section, nous allons considérer un mélange d'une phase CFC et d'une phase CC. Les phases sont supposées de texture isotrope, ainsi les moyennes de \mathbb{K}_a et \mathbb{K}_b ont même expression que précédemment. On peut donc exprimer les bornes de Voigt et Reuss à l'aide des relations suivantes⁵ :

$$\tilde{\mathbb{C}}^{\text{V}} = c^{\text{CFC}} \langle \mathbb{C}^{(r)} \rangle_{\text{CFC}} + c^{\text{CC}} \langle \mathbb{C}^{(r)} \rangle_{\text{CC}} \quad (\text{A.12a})$$

$$= \left[c^{\text{CFC}} \left(\frac{4}{5}\mu_a^{\text{CFC}} + \frac{6}{5}\mu_b^{\text{CFC}} \right) + c^{\text{CC}} \left(\frac{4}{5}\mu_a^{\text{CC}} + \frac{6}{5}\mu_b^{\text{CC}} \right) \right] \mathbb{K} \quad (\text{A.12b})$$

$$= \left(\frac{4}{5}\langle \mu_a \rangle + \frac{6}{5}\langle \mu_b \rangle \right) \mathbb{K} = 2\tilde{\mu}^{\text{V}} \mathbb{K} \quad (\text{A.12c})$$

$$\tilde{\mathbb{C}}^{\text{R}} = c^{\text{CFC}} \left\langle \left(\mathbb{C}^{(r)} \right)^{-1} \right\rangle_{\text{CFC}}^{-1} + c^{\text{CC}} \left\langle \left(\mathbb{C}^{(r)} \right)^{-1} \right\rangle_{\text{CC}}^{-1} \quad (\text{A.12d})$$

$$= \left[c^{\text{CFC}} \left(\frac{1}{5\mu_a^{\text{CFC}}} + \frac{3}{10\mu_b^{\text{CFC}}} \right) + c^{\text{CC}} \left(\frac{1}{5\mu_a^{\text{CC}}} + \frac{3}{10\mu_b^{\text{CC}}} \right) \right] \mathbb{K} \quad (\text{A.12e})$$

$$= \left(\frac{1}{5} \left\langle \frac{1}{\mu_a} \right\rangle + \frac{3}{10} \left\langle \frac{1}{\mu_b} \right\rangle \right) \mathbb{K} = \frac{1}{2\tilde{\mu}^{\text{R}}} \mathbb{K} \quad (\text{A.12f})$$

Ainsi pour $c^{\text{CFC}} = c^{\text{CC}}$ et $A = B = B' = 1$ on trouve $\tilde{\mu}^{\text{V}} = 33/80$ et $\tilde{\mu}^{\text{R}} = 5/18$ ce qui est en accord avec les données des figures 4.4, 4.11 et 4.12. Nous pourrions également exprimer les moyennes par phase des tenseurs de contrainte et de taux de déformation en utilisant les relations (2.36). En effet, connaissant $\underline{\underline{\dot{\epsilon}}}$, les équations de localisation donnant les moyennes par phase s'écrivent :

$$\langle \underline{\underline{\sigma}} \rangle_\varphi = \langle \mathbb{C}^{(r)} : \mathbb{A}^{(r)} \rangle_\varphi : \underline{\underline{\dot{\epsilon}}} = \langle \mathbb{B}^{(r)} \rangle_\varphi : \tilde{\mathbb{C}} : \underline{\underline{\dot{\epsilon}}} \quad (\text{A.13a})$$

$$\langle \underline{\underline{\dot{\epsilon}}} \rangle_\varphi = \langle \mathbb{A}^{(r)} \rangle_\varphi : \underline{\underline{\dot{\epsilon}}} = \langle \mathbb{S}^{(r)} : \mathbb{B}^{(r)} \rangle_\varphi : \tilde{\mathbb{C}} : \underline{\underline{\dot{\epsilon}}} \quad (\text{A.13b})$$

⁵La notation à deux tildes sera utilisée pour désigner le comportement global du polycristal et la notation simple tilde sera réservée aux modèles à deux transitions d'échelle pour désigner le comportement effectif d'une phase.

Lorsque ces tenseurs du quatrième ordre appliqués à $\underline{\dot{E}}$ sont de la forme $2p\mathbb{K}$, comme ce sera le cas dans la suite, on peut obtenir les relations suivantes en termes de grandeurs équivalentes :

$$\left(\langle \underline{\underline{\sigma}} \rangle_{\varphi}\right)_{\text{eq.}} = \sqrt{\frac{3}{2} (2p)^2 \left(\mathbb{K} : \underline{\dot{E}}\right) : \left(\mathbb{K} : \underline{\dot{E}}\right)} = 3 |p| \dot{E}_{\text{eq.}} \quad (\text{A.14a})$$

$$\left(\langle \underline{\dot{\underline{\underline{\sigma}}}} \rangle_{\varphi}\right)_{\text{eq.}} = \sqrt{\frac{2}{3} (2p)^2 \left(\mathbb{K} : \underline{\dot{E}}\right) : \left(\mathbb{K} : \underline{\dot{E}}\right)} = 2 |p| \dot{E}_{\text{eq.}} \quad (\text{A.14b})$$

$$(\text{A.14c})$$

Dans le cas des modèles de Voigt et Reuss :

$$\mathbb{A}_{\varphi}^{\text{V}} = \left\langle \mathbb{A}_{(r)}^{\text{V}} \right\rangle_{\varphi} = \mathbb{I} \quad \mathbb{B}_{\varphi}^{\text{V}} = \left\langle \mathbb{B}_{(r)}^{\text{V}} \right\rangle_{\varphi} = \frac{2\mu_a^{\varphi} + 3\mu_b^{\varphi}}{2\langle \mu_a \rangle + 3\langle \mu_b \rangle} \quad (\text{A.15a})$$

$$\mathbb{A}_{\varphi}^{\text{R}} = \left\langle \mathbb{A}_{(r)}^{\text{R}} \right\rangle_{\varphi} = \frac{\frac{2}{\mu_a^{\varphi}} + \frac{3}{\mu_b^{\varphi}}}{\left\langle \frac{2}{\mu_a} \right\rangle + \left\langle \frac{3}{\mu_b} \right\rangle} \quad \mathbb{B}_{\varphi}^{\text{R}} = \left\langle \mathbb{B}_{(r)}^{\text{R}} \right\rangle_{\varphi} = \mathbb{I} \quad (\text{A.15b})$$

Dans le cas biphasé, le module de Hashin et Shtrikman s'exprime sous la forme

$$\left\langle \left[\mathbb{S}^{(r)} + \mathbb{S}^* \right]^{-1} \right\rangle^{-1} = \left[\frac{2}{5} \left\langle \left(\frac{1}{2\mu_a} + \frac{1}{3\mu^0} \right)^{-1} \right\rangle + \frac{3}{5} \left\langle \left(\frac{1}{2\mu_b} + \frac{1}{3\mu^0} \right)^{-1} \right\rangle \right]^{-1} \mathbb{K} \quad (\text{A.16a})$$

$$\tilde{\mu}^{\text{HS}}(\mu^0) = \frac{1}{2} \left[\left(\frac{2}{5} \left\langle \left(\frac{1}{2\mu_a} + \frac{1}{3\mu^0} \right)^{-1} \right\rangle + \frac{3}{5} \left\langle \left(\frac{1}{2\mu_b} + \frac{1}{3\mu^0} \right)^{-1} \right\rangle \right)^{-1} - \frac{1}{3\mu^0} \right]^{-1} \quad (\text{A.16b})$$

Le calcul de ce terme dans le cas auto-cohérent nécessite une résolution numérique, on obtient ainsi $\tilde{\mu}^{\text{SC}} \approx 0.357$, ce qui correspond bien au tiers de la valeur initiale obtenue figures 4.4, 4.11 et 4.12. Exprimons, à l'aide de (A.7b), les tenseurs de localisation dans les phases pour cette formulation :

$$\mathbb{A}_{\varphi}^{\text{HS}} = \left\langle \mathbb{A}_{(r)}^{\text{HS}} \right\rangle_{\varphi} = \left[\frac{2}{5} \frac{2\tilde{\mu}^{\text{HS}} + 3\mu_0}{2\mu_a^{\varphi} + 3\tilde{\mu}^{\text{HS}}} + \frac{3}{5} \frac{2\tilde{\mu}^{\text{HS}} + 3\mu_0}{2\mu_b^{\varphi} + 3\tilde{\mu}^{\text{HS}}} \right] \mathbb{K} \quad (\text{A.17a})$$

$$\mathbb{A}_{\varphi}^{\text{SC}} = \left[\frac{2\tilde{\mu}^{\text{SC}}}{2\mu_a^{\varphi} + 3\tilde{\mu}^{\text{SC}}} + \frac{3\tilde{\mu}^{\text{SC}}}{2\mu_b^{\varphi} + 3\tilde{\mu}^{\text{SC}}} \right] \mathbb{K} \quad (\text{A.17b})$$

$$\mathbb{B}_{\varphi}^{\text{HS}} = \left\langle \mathbb{B}_{(r)}^{\text{HS}} \right\rangle_{\varphi} = \left[\frac{2}{5} \frac{\mu_a^{\varphi} (2\tilde{\mu}^{\text{HS}} + 3\mu_0)}{\tilde{\mu}^{\text{HS}} (2\mu_a^{\varphi} + 3\tilde{\mu}^{\text{HS}})} + \frac{3}{5} \frac{\mu_b^{\varphi} (2\tilde{\mu}^{\text{HS}} + 3\mu_0)}{\tilde{\mu}^{\text{HS}} (2\mu_b^{\varphi} + 3\tilde{\mu}^{\text{HS}})} \right] \mathbb{K} \quad (\text{A.17c})$$

$$\mathbb{B}_{\varphi}^{\text{SC}} = \left[\frac{2\mu_a^{\varphi}}{2\mu_a^{\varphi} + 3\tilde{\mu}^{\text{SC}}} + \frac{3\mu_b^{\varphi}}{2\mu_b^{\varphi} + 3\tilde{\mu}^{\text{SC}}} \right] \mathbb{K} \quad (\text{A.17d})$$

A partir de ces expressions, on obtient $\left(\langle \underline{\underline{\sigma}} \rangle_{\text{CFC}}\right)_{\text{eq.}} \approx 1.278$ et $\left(\langle \underline{\underline{\sigma}} \rangle_{\text{CC}}\right)_{\text{eq.}} \approx 0.864$, ce qui est en accord avec les résultats initiaux de la figure 4.4(b).

Dans le cas d'un biphasé contrasté, de contraste interphase M , les mêmes relations s'appliquent pour :

$$\mu_a^{\text{CC}} = \frac{1}{8} \quad \mu_a^{\text{CC}} = \frac{3}{8} \quad \mu_a^{\text{CFC}} = \frac{M}{4} \quad \mu_a^{\text{CC}} = \frac{3M}{4} \quad (\text{A.18})$$

On obtient ainsi les résultats fournis table A.1 qui sont à comparer aux premiers points de la figure 4.6. En considérant maintenant les modèles à deux transitions d'échelle, les résultats en termes de comportement effectif et de localisation se déduisent simplement à partir de ceux présentés jusqu'à maintenant. En effet, dans le cas présent ceux-ci se construisent en posant $\langle \mathbb{C}^{(r)} \rangle_{\varphi} = 2\tilde{\mu}_{\varphi} \mathbb{K}$ où $\tilde{\mu}_{\varphi}$ est obtenu à l'aide d'un modèle de Voigt, de Reuss ou auto-cohérent monophasé. Il ne reste plus ensuite qu'à considérer un

assemblage biphasé, ainsi :

$$\tilde{\tilde{\mathbf{C}}}^{2V} = 2\langle \tilde{\mu}_\varphi^V \rangle \mathbb{K} \quad (\text{A.19a})$$

$$\tilde{\tilde{\mathbf{C}}}^{2R} = \left\langle \frac{1}{2\tilde{\mu}_\varphi^R} \right\rangle^{-1} \mathbb{K} \quad (\text{A.19b})$$

$$\tilde{\tilde{\mathbf{C}}}^{W/HS+} = \left[\left\langle (2\tilde{\mu}_\varphi^{SC} + 3\tilde{\mu}_{CFC}^{SC})^{-1} \right\rangle^{-1} - 3\tilde{\mu}_{CFC}^{SC} \right] \mathbb{K} \quad (\text{A.19c})$$

$$\tilde{\tilde{\mathbf{C}}}^{W/HS-} = \left[\left\langle (2\tilde{\mu}_\varphi^{SC} + 3\tilde{\mu}_{CC}^{SC})^{-1} \right\rangle^{-1} - 3\tilde{\mu}_{CC}^{SC} \right] \mathbb{K} \quad (\text{A.19d})$$

On obtient ainsi, en considérant $\tilde{\mu}_{CC}^{SC} = 1/4$ et $\tilde{\mu}_{CFC}^{SC} = M/2$, les contraintes équivalentes macroscopiques⁶ reportées à la table A.2 et qui viennent valider les résultats linéaires obtenus à la figure 4.12.

De même, on obtient les relations de localisation liées aux moyennes par phase en posant :

$$\mathbb{A}_\varphi^{2V} = \left\langle \mathbb{A}_{(r)}^{SC} : \mathbb{A}_\varphi^V \right\rangle_\varphi = \left\langle \mathbb{A}_{(r)}^{SC} \right\rangle_\varphi \quad (\text{A.20a})$$

$$\mathbb{A}_\varphi^{W/HS+} = \left\langle \mathbb{A}_{(r)}^{SC} : \mathbb{A}_\varphi^{HS+} \right\rangle_\varphi = \left\langle \mathbb{A}_{(r)}^{SC} \right\rangle_\varphi : \mathbb{A}_\varphi^{HS+} \quad (\text{A.20b})$$

$$\mathbb{A}_\varphi^{W/HS-} = \left\langle \mathbb{A}_{(r)}^{SC} : \mathbb{A}_\varphi^{HS-} \right\rangle_\varphi = \left\langle \mathbb{A}_{(r)}^{SC} \right\rangle_\varphi : \mathbb{A}_\varphi^{HS-} \quad (\text{A.20c})$$

$$\mathbb{A}_\varphi^{2R} = \left\langle \mathbb{A}_{(r)}^{SC} : \mathbb{A}_\varphi^R \right\rangle_\varphi = \left\langle \mathbb{A}_{(r)}^{SC} \right\rangle_\varphi : \mathbb{A}_\varphi^R \quad (\text{A.20d})$$

⁶Il est à noter qu'un assemblage auto-cohérent à deux transitions d'échelle des deux phases donne, dans ce cadre linéaire, des résultats très proches de ceux obtenus à l'aide du modèle auto-cohérent biphasé classique (aucune différence n'est notable sur les premières décimales). Cette observation justifie de ne pas s'être intéressé à cette description dans notre étude.

M	1	2	5	10
$\left(\langle \underline{\sigma} \rangle\right)_{\text{eq.}}$	1.071	1.564	2.683	4.193
$\left(\langle \underline{\sigma} \rangle_{CFC}\right)_{\text{eq.}}$	1.278	2.152	4.258	7.196
$\left(\langle \underline{\sigma} \rangle_{CC}\right)_{\text{eq.}}$	0.864	0.976	1.108	1.190

TAB. A.1: Contrainte équivalente macroscopique et moyenne par phase en fonction du contraste.

M	Mode de calcul	1	2	5
$\left(\langle \underline{\sigma} \rangle^V\right)_{\text{eq.}}$	analytique	1.238	2.062	4.538
	numérique	1.232	2.054	4.518
$\left(\langle \underline{\sigma} \rangle^{2V}\right)_{\text{eq.}}$	analytique	1.125	1.875	4.125
	numérique	1.119	1.866	4.105
$\left(\langle \underline{\sigma} \rangle^{W/HS+}\right)_{\text{eq.}}$	analytique	1.083	1.676	3.384
	numérique	1.078	1.669	3.370
$\left(\langle \underline{\sigma} \rangle^{SC}\right)_{\text{eq.}}$	analytique	1.071	1.564	2.683
	numérique	1.066	1.557	2.673
$\left(\langle \underline{\sigma} \rangle^{W/HS-}\right)_{\text{eq.}}$	analytique	1.063	1.453	1.955
	numérique	1.057	1.447	1.947
$\left(\langle \underline{\sigma} \rangle^{2R}\right)_{\text{eq.}}$	analytique	1.000	1.200	1.364
	numérique	0.995	1.194	1.357
$\left(\langle \underline{\sigma} \rangle^R\right)_{\text{eq.}}$	analytique	0.833	1.000	1.136
	numérique	0.829	0.995	1.131

TAB. A.2: Contraintes équivalentes macroscopiques obtenues par le calcul analytique et à l'aide des simulations.

et en rappelant :

$$\left\langle \mathbb{A}_{(r)}^{\text{SC}} : \mathbb{A}_{\varphi}^{\text{HS-}} \right\rangle_{\varphi} = \left[\frac{2\tilde{\mu}^{\text{SC}}}{2\mu_a^{\varphi} + 3\tilde{\mu}^{\text{SC}}} + \frac{3\tilde{\mu}^{\text{SC}}}{2\mu_b^{\varphi} + 3\tilde{\mu}^{\text{SC}}} \right] \mathbb{K} \quad (\text{A.21a})$$

$$\mathbb{A}_{\varphi}^{\text{HS+}} = \frac{3\tilde{\mu}_{\text{CFC}}^{\text{SC}} + 2\tilde{\mu}^{\text{HS+}}}{3\tilde{\mu}_{\text{CFC}}^{\text{SC}} + 2\tilde{\mu}_{\varphi}^{\text{SC}}} \quad (\text{A.21b})$$

$$\mathbb{A}_{\varphi}^{\text{HS-}} = \frac{3\tilde{\mu}_{\text{CC}}^{\text{SC}} + 2\tilde{\mu}^{\text{HS-}}}{3\tilde{\mu}_{\text{CC}}^{\text{SC}} + 2\tilde{\mu}_{\varphi}^{\text{SC}}} \quad (\text{A.21c})$$

$$\mathbb{A}_{\varphi}^{\text{R}} = \tilde{S}_{\varphi}^{\text{SC}} : \tilde{C}^{2\text{R}} = \frac{\tilde{\mu}^{2\text{R}}}{\tilde{\mu}_{\varphi}^{\text{SC}}} \quad (\text{A.21d})$$

L'expression des taux de déformation moyens pour la phase CFC sont ainsi reportés à la table (table A.3). Ces expressions sont conformes aux résultats présentés figure 4.17.

M	Mode de calcul	1	2	5
$\left(\left\langle \dot{\underline{\underline{\varepsilon}}} \right\rangle_{\text{CFC}}^{\text{V}} \right)_{\text{eq.}}$	analytique	1.000	1.000	1.000
	numérique	1.000	1.000	1.000
$\left(\left\langle \dot{\underline{\underline{\varepsilon}}} \right\rangle_{\text{CFC}}^{2\text{V}} \right)_{\text{eq.}}$	analytique	1.000	1.000	1.000
	numérique	1.000	1.000	1.000
$\left(\left\langle \dot{\underline{\underline{\varepsilon}}} \right\rangle_{\text{CFC}}^{\text{W/HS+}} \right)_{\text{eq.}}$	analytique	0.889	0.824	0.780
	numérique	0.889	0.824	0.781
$\left(\left\langle \dot{\underline{\underline{\varepsilon}}} \right\rangle_{\text{CFC}}^{\text{SC}} \right)_{\text{eq.}}$	analytique	0.871	0.749	0.609
	numérique	0.872	0.750	0.609
$\left(\left\langle \dot{\underline{\underline{\varepsilon}}} \right\rangle_{\text{CFC}}^{\text{W/HS-}} \right)_{\text{eq.}}$	analytique	0.833	0.625	0.357
	numérique	0.834	0.626	0.358
$\left(\left\langle \dot{\underline{\underline{\varepsilon}}} \right\rangle_{\text{CFC}}^{2\text{R}} \right)_{\text{eq.}}$	analytique	0.667	0.400	0.182
	numérique	0.667	0.4	0.182
$\left(\left\langle \dot{\underline{\underline{\varepsilon}}} \right\rangle_{\text{CFC}}^{\text{R}} \right)_{\text{eq.}}$	analytique	0.667	0.400	0.182
	numérique	0.667	0.400	0.182

TAB. A.3: Taux de déformation équivalent moyen pour la phase CFC, comparaison des résultats analytiques et numériques.

A.2 Nullité de la rotation plastique

Les équations (A.1) sont obtenues en calculant la somme des douze (CFC) ou vingt-quatre (CC) termes de l'expression :

$$\mathbb{S}^{(r)} = \sum_k 2\alpha_{(k)}^{(r)} \underline{\underline{\mu}}_{(k)}^{(r)} \otimes \underline{\underline{\mu}}_{(k)}^{(r)} \quad (\text{A.22})$$

On vérifie alors la décomposition proposée suivant les tenseurs \mathbb{K}_a et \mathbb{K}_b . Une vérification de cette identité est obtenue en considérant par exemple l'un des douze systèmes du matériau CFC et en calculant le tenseur $\underline{\underline{\mu}}$ associé :

$$\sqrt{6}\underline{\underline{m}}_{(k')}^{(r)} \otimes \underline{\underline{n}}_{(k')}^{(r)} = \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix} \otimes \begin{pmatrix} 1 \\ -1 \\ 1 \end{pmatrix} = \begin{bmatrix} 1 & -1 & 1 \\ 1 & -1 & 1 \\ 0 & 0 & 0 \end{bmatrix} \quad (\text{A.23a})$$

$$\sqrt{6}\underline{\underline{\mu}}_{(k')}^{(r)} = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 1/2 \\ 0 & -1 & 1/2 \\ 1/2 & 1/2 & 0 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} 0 & 0 & 1/2 \\ 0 & 0 & 1/2 \\ 1/2 & 1/2 & 0 \end{bmatrix} \quad (\text{A.23b})$$

Dans cette dernière relation les deux termes sont extraits respectivement par \mathbb{K}_a et \mathbb{K}_b . On en déduit donc les égalités :

$$\underline{\underline{\mu}}_{(k')}^{(r)} : \mathbb{K}_a : \underline{\underline{\mu}}_{(k')}^{(r)} = \frac{2}{6} \quad \underline{\underline{\mu}}_{(k')}^{(r)} : \mathbb{K}_b : \underline{\underline{\mu}}_{(k')}^{(r)} = \frac{1}{6} \quad (\text{A.24})$$

Un argument de symétrie nous permet de justifier que les douze systèmes auront mêmes projetés suivant \mathbb{K}_a et \mathbb{K}_b . On en déduit donc :

$$\frac{\mathbb{S}^{(r)} :: \mathbb{K}_a}{\mathbb{K}_a :: \mathbb{K}_a} = 2A \quad \frac{\mathbb{S}^{(r)} :: \mathbb{K}_b}{\mathbb{K}_b :: \mathbb{K}_b} = \frac{2A}{3} \quad (\text{A.25})$$

conformément à (A.1). La même procédure peut être appliquée aux systèmes du matériau CC.

De même, on peut vérifier à l'aide de ce type de calcul la nullité de la rotation plastique $\underline{\underline{\omega}}_{\text{pl}}^{(r)}$ dans le cas de ces cristaux cubiques linéaires présentant même dureté sur leurs systèmes. Pour ce faire nous utilisons l'écriture suivante :

$$\underline{\underline{\omega}}_{\text{pl}}^{(r)} = \sum_k \dot{\gamma}_{(k)}^{(r)} \underline{\underline{w}}_{(k)}^{(r)} \quad (\text{A.26a})$$

$$= \sum_k 2\alpha_{(k)}^{(r)} \tau_{(k)}^{(r)} \underline{\underline{w}}_{(k)}^{(r)} \quad (\text{A.26b})$$

$$= \left(\sum_k 2\alpha_{(k)}^{(r)} \underline{\underline{w}}_{(k)}^{(r)} \otimes \underline{\underline{\mu}}_{(k)}^{(r)} \right) : \underline{\underline{\sigma}} \quad (\text{A.26c})$$

Or, on vérifie par le calcul que :

$$\sum_k \underline{\underline{w}}_{(k)}^{(r)} \otimes \underline{\underline{\mu}}_{(k)}^{(r)} = 0 \quad (\text{A.27})$$

pour les monocristaux CFC et pour les monocristaux CC (chacune des familles de systèmes prise séparément vérifie cette égalité). Cette annulation justifie par exemple l'absence de réorientation des grains dans le cadre du modèle de Taylor sans écrouissage (chapitre 4).

Annexe B

Quelques propriétés de la transformée de Legendre-Fenchel

B.1 Présentation

Cet outil très utile en analyse convexe est utilisé à plusieurs reprises dans ce document. Nous allons présenter ici quelques-unes de ses propriétés élémentaires. Afin d'explicitier l'influence de cette opération considérons une fonction f prise continue et strictement croissante et donc inversible (nous la supposons également nulle à l'origine et dérivable¹ pour simplifier). A tout point (x_0, y_0) on peut associer un domaine

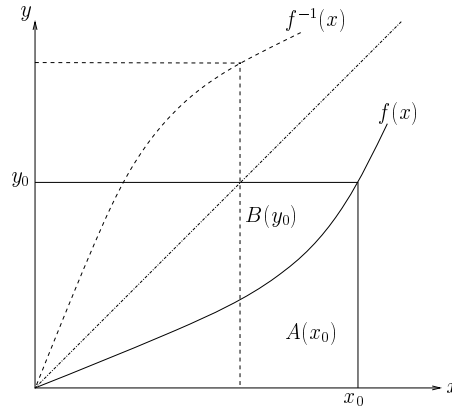


FIG. B.1: Partition de \mathbb{R}^2 par la fonction croissante f .

rectangulaire d'aire $x_0.y_0$ partitionné en deux ensembles par la courbe de f . Les aires de ces ensembles sont liées par les relations :

$$A(x_0) = \int_0^{x_0} f(t) dt \quad B(y_0) = \int_0^{y_0} f^{-1}(t) dt \quad A(x_0) + B(y_0) = x_0.y_0 \quad (\text{B.1a})$$

Cette expression n'est autre que l'égalité :

$$x.f(x) = \int_0^x \frac{d(t.f(t))}{dt} dt = \int_0^x f(t) dt + \int_0^x t.f'(t) dt \quad (\text{B.2a})$$

$$= \int_0^x f(t) dt + \int_0^{f(x)} f^{-1}(t) dt \quad (\text{B.2b})$$

$$= \int_0^y f^{-1}(t) dt + \int_0^{f^{-1}(y)} f(t) dt \quad (\text{B.2c})$$

¹On emploie le qualificatif de transformée de Legendre pour les fonctions dérivables et plutôt celui de transformée de Fenchel lorsque l'on traite d'ensembles sous-différentiels.

La transformée de Legendre-Fenchel permet d'associer A à B . En effet, la transformée convexe lie A (qui est strictement convexe du fait de la stricte croissance de f) à la fonction A^* telle que :

$$A^*(y_0) = \sup_x \{x.y_0 - A(x)\} \quad (\text{B.3})$$

Or la fonction $F(x) = x.y_0 - A(x)$ est strictement concave et atteint sa borne supérieure pour $y_0 = f(x)$ valeur pour laquelle A^* vaut donc :

$$A^*(y_0) = y_0.f^{-1}(y_0) - \int_0^{f^{-1}(y_0)} f(t)dt = B(y_0) \quad (\text{B.4})$$

La même démarche menée à partir de f^{-1} (qui est également strictement croissante en tant qu'inverse d'une fonction croissante) permet d'établir que $B^*(x) = A(x)$; la transformée de Legendre-Fenchel est donc involutive pour les fonctions convexes.

Dans le cas présent la transformation associe une fonction convexe de la variable x à une fonction convexe de la variable y (Elle permet ainsi de lier énergie potentielle et énergie complémentaire). Dans un cadre plus général, on notera que la transformée convexe d'une fonction même non convexe est convexe :

$$\forall \lambda \in [0; 1], \quad f^*(\lambda y_1 + (1 - \lambda)y_2) = \sup_x \{\lambda x.y_1 + (1 - \lambda)x.y_2 - f(x)\} \quad (\text{B.5a})$$

$$= \sup_x \{\lambda [x.y_1 - f(x)] + (1 - \lambda) [x.y_2 - f(x)]\} \quad (\text{B.5b})$$

$$\leq \lambda \sup_x \{x.y_1 - f(x)\} + (1 - \lambda) \sup_x \{x.y_2 - f(x)\} \quad (\text{B.5c})$$

$$\leq \lambda f^*(y_1) + (1 - \lambda) f^*(y_2) \quad (\text{B.5d})$$

Néanmoins, f^{**} sera convexe et ne correspondra plus à f si celle-ci ne l'était pas ; il s'agira en fait de son enveloppe convexe (voir §2.2.2.e). Une transformation identique peut être définie pour les fonctions $A(x)$ concaves, elle s'écrit :

$$A_*(y) = \inf_x \{x.y - A(x)\} \quad (\text{B.6})$$

et possède des propriétés similaires à la transformée convexe.

B.2 Transformée d'une somme de fonctions convexes

Le chapitre 3 nécessite de calculer la transformée d'une somme de fonctions ; nous explicitons ici la démarche permettant d'obtenir ce résultat.

Soient f et g deux fonctions convexes de la variable scalaire x . Soit h leur inf-convolution définie par :

$$h(x) = (f \oplus g)(x) = \inf_y \{f(x - y) + g(y)\} \quad (\text{B.7})$$

h est convexe, car :

$$\forall \lambda \in [0; 1], \quad h(\lambda x_1 + (1 - \lambda)x_2) = \inf_y \{f(\lambda x_1 + (1 - \lambda)x_2 - y) + g(y)\} \quad (\text{B.8a})$$

$$\leq \inf_y \{\lambda f(x_1 - y) + (1 - \lambda)f(x_2 - y) + g(y)\} \quad (\text{B.8b})$$

$$\leq \lambda \inf_y \{f(x_1 - y) + g(y)\} + (1 - \lambda) \inf_y \{f(x_2 - y) + g(y)\} \quad (\text{B.8c})$$

$$\leq \lambda h(x_1) + (1 - \lambda)h(x_2) \quad (\text{B.8d})$$

La transformée de Legendre-Fenchel de h s'écrit :

$$h^*(z) = \sup_x \left\{ x.z - \inf_y [f(x - y) + g(y)] \right\} \quad (\text{B.9a})$$

$$= \sup_{x,y} \{x.z - f(x - y) - g(y)\} \quad (\text{B.9b})$$

$$= \sup_{x,y} \{[(x - y).z - f(x - y)] + [y.z - g(y)]\} \quad (\text{B.9c})$$

$$= f^*(z) + g^*(z) \quad (\text{B.9d})$$

Cette dernière égalité provient de l'indépendance de l'optimisation du premier crochet par rapport à la variable y du fait du regroupement $x - y$ et de l'indépendance du second crochet vis-à-vis de x . h étant convexe h^* est convexe et $h^{**} = h$, ainsi en notant $F = f^*$, $G = g^*$, il vient :

$$(F(z) + G(z))^* = F^*(x) \oplus G^*(x) \quad (\text{B.10})$$

Cette propriété se généralise directement à la somme de n fonctions convexes :

$$\left(\sum_{i=0}^{n-1} f_i \right)^*(z) = \inf_{y_i \in \llbracket 1; n-1 \rrbracket} \left\{ f_0^* \left(z - \sum_{i=1}^{n-1} y_i \right) + \sum_{i=1}^{n-1} f_i^*(y_i) \right\} = \bigoplus_{i=0}^{n-1} f_i^*(z) \quad (\text{B.11})$$

De plus amples détails sur la transformée de Legendre-Fenchel peuvent être trouvés dans de nombreux ouvrages d'analyse convexe [54] ainsi que dans les cours synthétiques [40] et [33].

Bibliographie

- [1] *Alloy phase diagrams*, volume 3. American Society for Metals, 1993.
- [2] B.L. Adams, G.R. Canova, and A. Molinari. A statistical formulation of viscoplastic behavior in heterogeneous polycrystals. *Texture Microstruc.*, 11 :57–71, 1989.
- [3] B.L. Adams and T. Olson. The mesostructure - properties linkage in polycrystals. *Prog. Mat. Sc.*, 43 :1–88, 1998.
- [4] F.E. Al-Jouni. *Hot deformation and recrystallisation of two-phases steels*. PhD thesis, The University of Sheffield, 1983.
- [5] S. Ankem and H. Margolin. Alpha-beta interface sliding in Ti-Mn alloys. *Metall. Trans. A*, 14 :500–503, 1983.
- [6] A. Arbab. *Modélisation métallurgique du laminage à chaud des tôles d'acier au carbone non alliées*. PhD thesis, Ecole Centrale Paris, 1998.
- [7] G. Arnoux. Hot plane-strain compression of a duplex stainless steel - stage de dea, 2000.
- [8] D.G. Attwood and P.M. Hazzledine. A fiducial microgrid for high resolution metallography. *Met.*, 9 :483–501, 1976.
- [9] B. Bacroix, G. Canova, and H. Mecking. The prediction of deformation texture in α - β titanium. In *MECAMAT 91, Large plastic deformations*, 1993.
- [10] E.C. Bain and R.H. Aborn. Metals handbook, 1948.
- [11] O. Balancin, W.A.M. Hoffmann, and J.J. Jonas. Influence of microstructure on the flow behavior of duplex stainless steels at high temperatures. *Metall. Mater. Trans. A*, 31 :1353–1364, 2000.
- [12] R. Becker and S. Panchanadeeswaran. Effects of grain interactions on deformation and local texture in polycrystals. *Acta Metall. Mater.*, 43 :2701–2719, 1995.
- [13] M.J. Beran. *Statistical continuum theories*. Interscience Publishers, 1968.
- [14] M.J. Beran, T.A. Mason, B.L. Adams, and T. Olsen. Bounding elastic constants of an orthotropic polycrystal using measurements of the microstructure. *J. Mech. Phys. Solids*, 44 :1543–1563, 1996.
- [15] J.G. Berryman. Relationship between specific surface area and spatial correlation functions for anisotropic porous media. *J. Math. Phys.*, 28 :244–245, 1987.
- [16] J.H. Beynon and C.M. Sellars. Modelling microstructure and its effects during multipass hot-rolling. *ISIJ Int.*, 32 :359–367, 1992.
- [17] A. Bodin. *Intercritical deformation of low alloy steel*. PhD thesis, Technische Universiteit Delft, 2002.
- [18] C. Boldetti. *Multi-scale measurement and modelling of large deformation of structural metals during thermomechanical processing*. PhD thesis, The University of Sheffield, 2006.
- [19] J.F. Bonnans, J.C. Gilbert, C. Lemaréchal, and C. Sagastizàbal. *Optimisation Numérique : aspects théoriques et pratiques*. Springer, 1997.
- [20] M. Bornert. *Morphologie microstructurale et comportement mécanique ; caractérisations expérimentales, approches par bornes et estimations auto-cohérentes généralisées*. PhD thesis, Ecole Nationale des Ponts et Chaussées, 1996.
- [21] M. Bornert. Saint-Venant's principle, macrohomogeneity and variational formulations for elastic random media. In J. Salençon, editor, *Saint-Venant Symposium, ENPC*, 1997.
- [22] M. Bornert, T. Bretheau, and P. Gilormini. *Homogénéisation en mécanique des matériaux 1 - Matériaux aléatoires élastiques et milieux périodiques*. Hermes Science Publications, 2001.

- [23] M. Bornert, T. Bretheau, and P. Gilormini. *Homogénéisation en mécanique des matériaux 2 - Comportements non linéaires et problèmes ouverts*. Hermes Science Publications, 2001.
- [24] M. Bornert, R. Masson, P. Ponte Castañeda, and A. Zaoui. Second-order estimates for the effective behaviour of viscoplastic polycrystalline materials. *J. Mech. Phys. Solids*, 49 :2737–2764, 2001.
- [25] M. Bornert and P. Ponte Castañeda. Second-order estimates of the self-consistent type for viscoplastic polycrystals. *Proc. Roy. Soc. A*, 454 :3035–3045, 1998.
- [26] R. Brenner, O. Castelnau, and L. Badea. Mechanical field fluctuations in polycrystals estimated by homogenization techniques. *Proc. R. Soc. Lond. A*, 460 :3589–3612, 2004.
- [27] A. Brown. Hot deformation of duplex stainless steel, 2004.
- [28] H.J. Bunge and C. Esling. Texture et anisotropie des matériaux. *Tech. Ing.*, M605 :1–38.
- [29] G. Cailletaud. Une approche micromécanique du comportement des polycristaux. *Revue de physique appliquée*, 23 :353–363, 1988.
- [30] O. Castelnau, R. Brenner, and R.A. Lebensohn. The effect of strain heterogeneity on the work hardening of polycrystals predicted by mean-field approaches. *Acta Mater.*, 54 :2745–2756, 2006.
- [31] M. Chakroun. Etude d'un acier biphasé soumis à un essai de compression plane. Stage d'option de l'Ecole Polytechnique, 2006.
- [32] P. Cizek and B.P. Wynne. A mechanism of ferrite softening in a duplex stainless steel deformed in hot torsion. *Mat. Sci. Eng.*, A230 :88–94, 1997.
- [33] G. Cohen. Convexité et optimisation. Cours de l'Ecole Nationale des Ponts et Chaussées, 2000.
- [34] P.B. Corson. Correlation functions for predicting properties of heterogeneous materials I. Experimental measurement of spatial correlation functions in multiphase solids. *J. Appl. Phys.*, 45 :3159–3164, 1976.
- [35] P.B. Corson. Correlation functions for predicting properties of heterogeneous materials II. Empirical construction of spatial correlation functions in two phase solids. *J. Appl. Phys.*, 45 :3165–3170, 1976.
- [36] M. Coster and J.L. Chermant. *Précis d'analyse d'images*. Editions du centre National de la Recherche Scientifique, 1989.
- [37] P. Coulomb. *Textures dans les métaux de réseau cubique*. Dunod, 1972.
- [38] P.J. Cunnat. Acier inoxydables - critère de choix et structure. *Tech. Ing.*, M4540 :1–17, 2000.
- [39] P.J. Cunnat. Acier inoxydables - propriétés. résistance à la corrosion. *Tech. Ing.*, M4541 :1–31, 2000.
- [40] A. Damblamian. Analyse hilbertienne et convexe. Cours de l'Ecole Polytechnique, 1996.
- [41] P.R. Dawson and E. Marin. Computational mechanics for metal deformation processes using polycrystal plasticity. *Adv. Appl. Mech.*, 34 :77–169, 1998.
- [42] G. deBotton and P. Ponte Castañeda. Elastoplastic constitutive relations for fiber-reinforced solids. *Int. J. Solids Struct.*, 30 :1865–1890, 1993.
- [43] G. deBotton and P. Ponte Castañeda. Variational estimates for the creep behavior of polycrystals. *Proc. R. Soc. Lond. A*, 448 :121–142, 1995.
- [44] P. Debye, Anderson H.R.Jr., and H. Brumberger. Scattering by an inhomogeneous solid II. The correlation function and its application. *J. Appl. Phys.*, 28 :679–683, 1958.
- [45] P. Delobelle. Synthesis of the elastoviscoplastic behavior and modelization of an austenitic stainless-steel over a large temperature-range, under uniaxial and biaxial loadings. *Int. J. Plast.*, 9 :65–118, 1993.
- [46] R. Dendievel, G. Bonnet, and J.R. Willis. Bounds for the creep behaviour of polycrystalline materials. In G.J. Dvorak, editor, *Inelastic deformation of composite materials*, pages 175–192. New York : Springer-Verlag, 1991.
- [47] M. Dexet. *Méthode de couplage entre expérimentations et simulations numériques en vue de l'identification de lois de comportement intracristallin : application aux alliages de zirconium*. PhD thesis, Ecole Polytechnique, 2006.
- [48] P. Doumalin. *Microextensométrie locale par corrélation d'images numériques : application aux études micromécaniques par microscopie électronique à balayage*. PhD thesis, Ecole Polytechnique, 2000.

- [49] D. Dunst, R. Dendievel, and H. Mecking. The development of deformation textures as a function of the phase fractions in two-phase titanium-based alloys. *Mater. Sci. Forum*, 157-162 :665–672, 1994.
- [50] D. Dunst and H. Mecking. Analysis of experimental and theoretical rolling textures of two-phase titanium alloys. *Z. Metallkd.*, 87 :498–507, 1996.
- [51] L. Duprez, B.C. De Cooman, and N. Akdut. Mechanical behavior of duplex stainless steel at high temperature. Technical report, LISm, Ghent University, Belgium.
- [52] L. Duprez, B.C. De Cooman, and N. Akdut. Flow stress and ductility of duplex stainless steel during high temperature torsion deformation. *Metall. Mat. Trans. A*, 33 :1931–1938, 2002.
- [53] L. Duprez, B.C. De Cooman, and N. Akdut. High-temperature stress and partitioning in duplex stainless steel. *Int. J. Mat. Res.*, 93 :236–243, 2002.
- [54] I. Ekeland and R. Temam. *Analyse convexe et problèmes variationnels*. Dunod-Gauthiers-Villars, 1974.
- [55] J. D. Eshelby. The determination of the elastic field of an ellipsoidal inclusion, and related problems. *Proc. R. Soc. Lond. A*, 241 :376–396, 1957.
- [56] P. Etingof and B.L. Adams. Representations of polycrystalline microstructure by n -point correlation tensors. *Texture Microstruc.*, 21 :17–37, 1993.
- [57] E. Evangelista, H.J. McQueen, M. Niewczas, and M. Cabibbo. Hot workability of 2304 and 2205 duplex stainless steels. *Can. Metall. Quart.*, 43 :339–354, 2004.
- [58] Izquierdo F. Localised strain measurement in two-phase stainless steels undergoing plane strain compression testing at high temperature, 2001.
- [59] P. Fabrègue. Métallurgie du laminage à chaud. *Tech. Ing.*, M 7860 :1–21, 2000.
- [60] D.S. Fields and W.A. Backofen. Determination of strain hardening characteristics by torsion testing. *Proc. ASTM*, 57 :1259–1271, 1957.
- [61] D. François, A. Pineau, and A. Zaoui. *Comportement mécanique des matériaux - Elasticité et plasticité*. Hermes, 1995.
- [62] D. François, A. Pineau, and A. Zaoui. *Comportement mécanique des matériaux - Viscoplasticité, endommagement, mécanique de la rupture, mécanique du contact*. Hermes, 1995.
- [63] H. Garmestani, S. Lin, and B.L. Adams. Statistical continuum theory for inelastic behavior of two phase medium. *Int. J. Plasticity*, 14 :719–731, 1998.
- [64] F. Garofalo. *Fundamentals of creep and creep rupture in metals*. Mac Millan N.Y., 1965.
- [65] L. Gelebart and J. Jumel. Modélisation du comportement élastoviscoplastique d'un acier austéno-ferritique - stage de dea, 1999.
- [66] P. Gilormini. A short manual for the VariPoly program, 2004.
- [67] P. Gilormini, M.V. Nebozhyn, and P. Ponte Castañeda. Accurate estimates for the creep behavior of hexagonal polycrystals. *Acta Mater.*, 49 :329–337, 2001.
- [68] A.M. Gokhale, A. Tewari, and H. Garmestani. Constraints on microstructural two-point correlation functions. *Scripta Mater.*, 53 :989–993, 2005.
- [69] Z. Gronostajski. The constitutive equations of FEM analysis. *J. Mater. Process. Technol.*, 106 :40–44, 2000.
- [70] Z. Hashin and S. Shtrikman. A variational approach to the theory of elastic behaviour of multiphase materials. *J. Mech. Phys. Solids*, 11 :128–140, 1963.
- [71] E. Heripre. *Méthode de couplage multi-échelles entre simulations numériques polycristallines et mesures de champs pour l'identification des paramètres de loi de comportement et de fissuration des matériaux : application à l'étude des alliages TiAl*. PhD thesis, Ecole Polytechnique, 2006.
- [72] C.A. Hernandez, S.F. Medina, and J. Ruiz. Modelling austenite flow curves in low alloy and microalloyed steels. *Acta Mater.*, 44 :155–163, 1996.
- [73] L. Hernandez Castillo. *Determination of micro-scale strain distribution in hot-worked steel micro-structure*. PhD thesis, The University of Sheffield, 2005.
- [74] L. Hernandez Castillo and C. Pinna. Axisymmetric compression test on duplex and austenitic stainless steel. Technical report, The University of Sheffield, 2006.

- [75] L.E. Hernandez Castillo, J.H. Beynon, C. Pinna, and S. van der Zwaag. Micro-scale strain distribution in hot-worked duplex stainless steel. *Steel Res.*, 76 :137–141, 2005.
- [76] A.V. Hershey. The elasticity of an isotropic aggregate of anisotropic cubic crystals. *J. Appl. Mech.*, 21 :236–240, 1954.
- [77] R. Hill. Continuum micro-mechanics of elastoplastic polycrystals. *J. Mech. Phys. Solids*, 13 :89–101, 1965.
- [78] R. Hill. The essential structure of constitutive laws for metal composites and polycrystals. *J. Mech. Phys. Solids*, 15 :79–95, 1967.
- [79] T.M. Holden, R.A. Holt, and C.N. Tomé. Intergranular strains in Inconel-600. *Mat. Sci. Eng.*, A282 :131–136, 2000.
- [80] M. Huang. The n -point orientation correlation function and its application. *Int. J. Solids Struct.*, 42 :1425–1441, 2005.
- [81] F.J. Humphreys and M. Hatherly. *Recrystallization and related annealing phenomena*. Elsevier, 2003.
- [82] J.W. Hutchinson. Bounds and self-consistent estimates for creep of polycrystalline materials. *Proc. R. Soc. Lond. A*, 348 :101–127, 1976.
- [83] S. Héraud. *Du polycristal au multicristal : élaboration d'un mésoscope numérique pour une analyse locale en élastoviscoplasticité*. PhD thesis, Ecole Polytechnique, 1998.
- [84] M. Idiart. *Macroscopic behavior and field statistics in viscoplastic composites*. PhD thesis, Ecole Polytechnique, 2006.
- [85] M.I. Idiart, H. Moulinec, P. Ponte castañeda, and P. Suquet. Macroscopic behavior and field fluctuations in viscoplastic composites : Second-order estimates versus full-field simulations. *J. Mech. Phys. Solids*, 54 :1029–1063, 2006.
- [86] M.I. Idiart and P. Ponte castañeda. Field statistics in nonlinear composites. I Theory. *Proc. R. Soc. Lond. A*, 463 :182–202, 2007.
- [87] M.I. Idiart and P. Ponte castañeda. Field statistics in nonlinear composites. II Applications. *Proc. R. Soc. Lond. A*, 463 :203–222, 2007.
- [88] M.I. Idiart and P. Ponte castañeda. Variational linear comparison bounds for nonlinear composites with anisotropic phases. I. General results. *Proc. R. Soc. Lond. A*, 463 :907–924, 2007.
- [89] M.I. Idiart and P. Ponte castañeda. Variational linear comparison bounds for nonlinear composites with anisotropic phases. II. Crystalline materials. *Proc. R. Soc. Lond. A*, 463 :925–943, 2007.
- [90] A. Iza-Mendia, A. Piñol-Juez, I. Gutiérrez, and J.J. Urcola. Study of the role of the interface coherence on the hot deformation behaviour of duplex stainless steel. *Key Eng. Mat.*, 127-131 :1033–1040, 1997.
- [91] A. Iza-Mendia, A. Piñol-Juez, J.J. Urcola, and I. Gutiérrez. Microstructural and mechanical behavior of a duplex stainless steel under hot working conditions. *Metal. Mater. Trans. A*, 29 :2975–2986, 1998.
- [92] D. Jeulin. *Mechanics of random and multiscale microstructures*, chapter Random structure models for homogenization and fracture statistics, pages 1–59. Springer Wien NewYork, 2001.
- [93] J.J. Jonas. A comparison of creep and hot working strain-rate relationship. *Trans. ASM Quart.*, 62 :300, 1969.
- [94] A.M. Jorge Jr., W. Regone, and O. Balancin. Effect of competing hardening and softening mechanisms on the flow stress curve modeling of ultra-low carbon steel at high temperature. *J. Mat. Proc. Tech.*, 142 :415–421, 2003.
- [95] S.R. Kalidindi, C.A. Bronkhorst, and L. Anand. Crystallographic texture evolution in bulk deformation processes of fcc metals. *J. Mech. Phys. Solids*, 40 :537–569, 1992.
- [96] U.F. Kocks. Laws for work-hardening and low-temperature creep. *J. Eng. Mater. - Trans. ASME*, 98 :76–85, 1976.
- [97] U.F. Kocks, C.N. Tomé, and H.R. Wenk. *Texture and anisotropy*. Cambridge university press, 1998.

- [98] E. Kröner. *Modelling small deformations of polycrystals*, chapter Statistical modelling, pages 229–291. Elsevier applied science, 1986.
- [99] C. Larsson, B. Clausen, T.M. Holden, and M.A.M. Bourke. Measurements and predictions of strain pole figures for uniaxially compressed stainless steel. *Scripta Mater.*, 51 :571–575, 2004.
- [100] R.A. Lebensohn. N-site modeling of a 3D viscoplastic polycrystal using fast fourier transform. *Acta Metall. Mater.*, 49 :2723–2737, 2001.
- [101] R.A. Lebensohn and G.R. Canova. A self-consistent approach for modelling texture development of two-phase polycrystals : application to titanium alloys. *Acta Mater.*, 45 :3687–3694, 1997.
- [102] R.A. Lebensohn, Y. Liu, and P. Ponte Castañeda. Macroscopic properties and field fluctuations in model power-law polycrystals : full-field solutions versus self-consistent estimates. *Proc. R. Soc. Lond. A*, 460 :1381–1405, 2004.
- [103] R.A. Lebensohn and C.N. Tomé. A self-consistent anisotropic approach for the simulation of plastic deformation and texture development of polycrystals : application to zirconium alloys. *Acta Metall. Mater.*, 41 :2611–2624, 1993.
- [104] R.A. Lebensohn, C.N. Tomé, and U.F. Kocks. A model for texture development dominated by deformation twinning : Application to zirconium alloys. *Acta Metall. Mater.*, 39 :2667–2680, 1991.
- [105] R.A. Lebensohn, P.A. Turner, and G.R. Canova. Recent advances in modelling polycrystals with complex microstructures. *Comp. Mater. Sci.*, 9 :229–236, 1997.
- [106] A. Lebon, J. Rofes-Vernis, and C. Rossard. Recrystallization and precipitation during hot working of a Nb-bearing steel. *Metal Sci.*, 9 :36–40, 1975.
- [107] B.J. Lee, S. Ahzi, and R.J. Asaro. On the plasticity of low symmetry crystals lacking five independent slip systems. *Mech. Mater.*, 20 :1–8, 1995.
- [108] J. Lemaitre and J.L. Chaboche. *Mécanique des matériaux solides*. Dunod, 2001.
- [109] P. Lequeu, P. Gilormini, F. Montheillet, B. Bacroix, and J.J. Jonas. Yield surfaces for textured polycrystals. I. Crystallographic approach. *Acta Metall.*, 35 :439–453, 1987.
- [110] Y. Leroy and P. Ponte Castañeda. Bounds on the self-consistent approximation for nonlinear media and implications for the second-order method. *C. R. Acad. Sci.*, 329 :571–577, 2001.
- [111] S. Lin, H. Garmestani, and B.L. Adams. The evolution of probability functions in an inelastically deforming two-phase medium. *Int. J. Solids Struct.*, 37 :423–434, 2000.
- [112] P. Lipinski, A. Naddari, and M. Berveiller. Recent results concerning the modeling of polycrystalline plasticity at large strains. *Int. J. Solids Struct.*, 29 :1873–, 1992.
- [113] R. Lipton and B. Vernescu. Variational methods, size effects and extremal microgeometries for elastic composites with imperfect interface. *Math. Models Methods Appl. Sci.*, 5 :1139–1173, 1995.
- [114] D.C. Liu and J. Nocedal. On the limited memory BFGS method for large scale optimization. *Math. Programming*, 45 :503–528, 1989.
- [115] Y. Liu. *Macroscopic behavior, field fluctuations and texture evolution in viscoplastic polycrystals*. PhD thesis, the University of Pennsylvania, 2000.
- [116] Y. Liu, P. Gilormini, and P. Ponte Castañeda. Variational self-consistent estimates for texture evolution in viscoplastic hexagonal polycrystals. *Acta Mater.*, 51 :5425–5437, 2003.
- [117] Y. Liu, P. Gilormini, and P. Ponte Castañeda. Homogenization estimates for texture evolution in halite. *Tectonophysics*, 406 :179–195, 2005.
- [118] Y. Liu and P. Ponte Castañeda. Homogenization estimates for the average behavior and field fluctuations in cubic and hexagonal viscoplastic polycrystals. *J. Mech. Phys. Solids*, 52 :1175–1211, 2004.
- [119] Y. Liu and P. Ponte Castañeda. Second-order theory for the effective behavior and field fluctuations in viscoplastic polycrystals. *J. Mech. Phys. Solids*, 52 :467–495, 2004.
- [120] T. Lorentzen, M.R. Daymond, Clausen B., and C.N. Tomé. Lattice strain evolution during cyclic loading of stainless steel. *Acta Mater.*, 50 :1627–1638, 2002.
- [121] M.S. Loveday, G.J. Mahon, B. Roebuck, A.J. Lacey, E.J. Palmiere, Sellars C.M., and M.R. van der Winden. Measurement of flow stress in hot plane strain compression tests. *Mater. High Temp.*, 23 :85–118, 2006.

- [122] T.A. Mason and B.L. Adams. Use of microstructural statistics in predicting polycrystalline material properties. *Metal. Mater. Trans. A*, 30 :969–979, 1999.
- [123] R. Masson. *Estimation non linéaire du comportement global de matériaux hétérogènes en formulation affine - Application aux alliages de zirconium*. PhD thesis, Ecole Polytechnique, 1998.
- [124] R. Masson, M. Bornert, P. Suquet, and A. Zaoui. An affine formulation for the prediction of the effective properties of nonlinear composites and polycrystals. *J. Mech. Phys. Solids*, 48 :1203–1227, 2000.
- [125] J.P. Mathieu. *Analyse et modélisation micromécanique du comportement et de la rupture fragile de l'acier 16MND5 : prise en compte des hétérogénéités microstructurales*. PhD thesis, Ecole Nationale Supérieure d'Arts et Métiers, 2006.
- [126] H.J. McQueen, S. Yue, N.D. Ryan, and E. Fry. Hot working characteristics of steel in austenite state. *J. Mat. Proc. Tech.*, 53 :293–310, 1995.
- [127] S.F. Medina and Hernandez C.A. General expression of the Zener-Hollomon parameter as a function of the chemical composition of low alloy and microalloyed steels. *Acta Mat.*, 44 :137–148, 1996.
- [128] M.N. Miller. Bounds for effective electrical, thermal and magnetic properties of heterogeneous materials. *J. Math. Phys.*, 10 :1988–2003, 1969.
- [129] G.W. Milton. *The theory of composites*. Cambridge university press, 2002.
- [130] A. Molinari, G.R. Canova, and S. Ahzi. A self-consistent approach of the large deformation polycrystal viscoplasticity. *Acta. Metall. Mater.*, 35 :2983–2994, 1987.
- [131] T. Mori and K. Tanaka. Average stress in matrix and average elastic energy of materials with misfitting inclusions. *Acta. Metall.*, 21 :571–574, 1973.
- [132] H. Moulinec and P. Suquet. A numerical method for computing the overall response of nonlinear composites with complex microstructure. *Comput. Methods Appl. Mech. Eng.*, 157 :69–94, 1998.
- [133] H. Mughrabi. Dislocation wall and cell structures and long-range internal stresses in deformed metal crystals. *Acta. Metall.*, 31 :1367–1379, 1983.
- [134] T.L.F. Müller. *The hot deformation of duplex alloy*. PhD thesis, The University of Sheffield, 1967.
- [135] M.V. Nebozhyn. *Variational self-consistent estimates for the effective behavior of viscoplastic polycrystal*. PhD thesis, the University of Pennsylvania, 2000.
- [136] M.V. Nebozhyn, P. Gilormini, and P. Ponte Castañeda. Variational self-consistent estimates for viscoplastic polycrystal with highly anisotropic grains. *C. R. Acad. Sci.*, 328 :11–17, 2000.
- [137] M.V. Nebozhyn, P. Gilormini, and P. Ponte Castañeda. Variational self-consistent estimates for cubic viscoplastic polycrystals : the effect of grain anisotropy and shape. *J. Mech. Phys. Solids*, 49 :313–340, 2001.
- [138] W.D. Nix, J.C. Gibeling, and D.A. Hughes. Time-dependent deformation of metals. *Metall. Trans. A*, 16 :2215–2226, 1985.
- [139] J. Nocedal. Theory of algorithms for unconstrained optimization. *Acta Num.*, 1 :199–242, 1992.
- [140] R.W. Ogden. *Non-Linear Elastic Deformations*. Dover publications, inc., 1984.
- [141] J. Ohser and F. Mücklich. *Statistical analysis of microstructures in materials science*. John Wiley & Sons, 2000.
- [142] E. Orowan. The calculation of roll pressure in hot and cold flat rolling. *Proc. Inst. Mech. Eng.*, 150 :140–167, 1943.
- [143] E. Orowan and K.J. Pascoe. A simple method of calculating roll pressure and power consumption in flat hot rolling. *Iron & Steel Inst. Special Report*, 34 :124–126, 1946.
- [144] D.M. Parks and S. Ahzi. Polycrystalline plastic deformation and texture evolution for crystals lacking five independent systems. *J. Mech. Phys. Solids*, 38 :701–724, 1990.
- [145] S. Patiño. Hot plane-strain compression of a duplex stainless steel - internal report. Technical report, Ecole Polytechnique-The University of Sheffield, 1999.
- [146] A. Piñol Juez, A. Iza-Mendia, and I. Gutiérrez. δ/γ interface boundary sliding as a mechanism for strain accommodation during hot deformation in a duplex stainless steel. *Metall. Mater. Trans. A*, 31 :1671–1677, 2000.

- [147] A. Piñol Juez, A. Iza-Mendia, I. Gutiérrez, and Urcola J.J. Influence of phase morphology and deformation mode on the behavior during hot working of a two-ductile phase composite. *Key Eng. Mat.*, 127-131 :1025–1032, 1997.
- [148] C. Pinna. Duplex stainless steel. Technical report, The University of Sheffield, 2001.
- [149] C. Pinna, M. Bornert, J.H. Beynon, and C.M. Sellars. Experimental investigation and micromechanical modeling of the hot deformation of duplex stainless steel. In *COM2000, Mathematical modeling in metal processing and manufacturing*, 2000.
- [150] J.P. Poirier. *Plasticité à haute température des solides cristallins*. Eyrolles, 1976.
- [151] P. Ponte Castañeda. Second-order homogenization estimates for nonlinear composites incorporating field fluctuations : I-theory. *J. Mech. Phys. Solids*, 50 :737–757, 2002.
- [152] P. Ponte Castañeda. The effective mechanical properties of nonlinear isotropic composites. *J. Mech. Phys. Solids*, 39 :45–71, 1991.
- [153] P. Ponte Castañeda. New variational principles in plasticity and their application to composite materials. *J. Mech. Phys. Solids*, 40 :1757–1788, 1991.
- [154] P. Ponte Castañeda. A new variational principle and its application to nonlinear heterogeneous systems. *J. Appl. Math.*, 52 :1321–1341, 1992.
- [155] P. Ponte Castañeda. Exact second-order estimates for the effective mechanical properties of nonlinear composite materials. *J. Mech. Phys. Solids*, 44 :827–862, 1996.
- [156] P. Ponte Castañeda. *Continuum micromechanics CISM courses and lectures n ° 377*, chapter Nonlinear composite materials : effective constitutive behavior and microstructure evolution, pages 131–195. Springer Wien New-York, 1997.
- [157] P. Ponte Castañeda. Nonlinear polycrystals with microstructure evolution. In E. Inan and K.Z. Markov, editors, *Continuum Models and Discrete Systems 9*, 1998.
- [158] P. Ponte Castañeda. Second-order homogenization estimates for nonlinear composites incorporating field fluctuations : II-applications. *J. Mech. Phys. Solids*, 50 :759–782, 2002.
- [159] P. Ponte Castañeda. Heterogeneous materials. Cours de l'Ecole Polytechnique, Majeure 1, MEC553, 2004.
- [160] P. Ponte Castañeda and M.V. Nebozhyn. Variational estimates of the self-consistent type for the effective behaviour of some model nonlinear polycrystals. *P. Roy. Soc. A*, 453 :2715–2724, 1997.
- [161] P. Ponte Castañeda and P. Suquet. Nonlinear composites. *Adv. Appl. Mech.*, 34 :171–302, 1998.
- [162] P. Ponte Castañeda and P. Suquet. Nonlinear composites and microstructure evolution. In H. Aref and J.W. Phillips, editors, *20th International Congress of Theoretical and Applied Mechanics*, 2001.
- [163] P. Ponte Castañeda and J.R. Willis. The effective behavior of nonlinear composites : a comparison between two methods. *Mater. Sci. Forum*, 123-125 :351–360, 1993.
- [164] P. Ponte Castañeda and J.R. Willis. Variational second-order estimates for nonlinear composites. *Proc. Roy. Soc. A*, 455 :1799–1811, 1999.
- [165] E. Prasman and E.L. Thomas. High-strain tensile deformation of sphere-forming triblock copolymer/mineral oil blend. *J. Polym. Sci. Pol. Phys.*, 36 :1625–1636, 1998.
- [166] W.H. Press, S.A. Teukolsky, W.T. Vetterling, and B.P. Flannery. *Numerical recipes in Fortran*. Cambridge university press, 1994.
- [167] F.B. Prinz and A.S. Argon. The evolution of plastic resistance in large strain plastic flow of single phase subgrain forming metals. *Acta Metall.*, 32 :1021–1028, 1984.
- [168] A. Rekik. *Une méthodologie pour l'évaluation précise des procédures de linéarisation en homogénéisation non linéaire*. PhD thesis, Ecole Polytechnique, 2006.
- [169] A. Rekik, F. Auslender, M. Bornert, and A. Zaoui. Objective evaluation of linearization procedures in nonlinear homogenization : A methodology and some implications on the accuracy of micromechanical schemes. *Int. J. Solids Struct.*, 44 :3468–3496, 2007.
- [170] R. Roberti and G. Silva. The microstructure of duplex austenitic-ferritic stainless steels. *Avesta Stainless Bull.*, 3 :18–21, 1979.
- [171] B. Roeduck, J.D. Lord, M. Brooks, M.S. Loveday, C.M. Sellars, and R.W. Evans. Measurement of flow stress in hot axisymmetric compression tests. *Mater. High Temp.*, 23 :59–83, 2006.

- [172] C. Rossard and P. Blain. Rapport IRSID 174, 1957.
- [173] C. Rossard and P. Blain. Premiers résultats de recherche sur la déformation des aciers à chaud. Mise au point d'appareillage spécialement étudié. *Rev. Met.*, 55 :573, 1958.
- [174] G.W. Rowe. *An introduction to principles of metalworking*. Edward Arnold, London, 1965.
- [175] J.P. Sah, G.J. Richardson, and C.M. Sellars. Recrystallization during hot deformation of nickel. *J. Aust. Inst. Met.*, 14 :292–297, 1969.
- [176] J. Salençon. *Mécanique des milieux continus*. Les éditions de l'Ecole Polytechnique, 2002.
- [177] S.K. Samanta. Effect of strain rate on a compressive strength of tool steel at elevated temperature. *ISI Pub.*, 108 :122–130, 1968.
- [178] C.M. Sellars. Les traitements thermomécaniques. 24ème Colloque de Métallurgie, INSTN Saclay France, 1981.
- [179] C.M. Sellars. The kinetics of softening processes during hot working of austenite. *Czech. J. Phys.*, 35 :239–248, 1985.
- [180] C.M. Sellars. Modeling microstructural development during hot-rolling. *Mat. Sci. Technol.*, 6 :1072–1081, 1990.
- [181] C.M. Sellars, J.P. Sah, J.H. Beynon, and S.R. Foster. Report on research work supported by src grant b/rg/1481, 1976.
- [182] C.M. Sellars and W.J.McG. Tegart. La relation entre la résistance et la structure dans la déformation à chaud. *Mem. Sci. Rev. Metall.*, 63 :731–746, 1966.
- [183] H. Shi, A.J. McLaren, C.M. Sellars, R. Sahani, and Bolingbroke. Hot plain strain compression testing of aluminium alloys. *J. Test. Eval.*, 25 :61–73, 1997.
- [184] N.J. Silk and M.R. van der Winden. Interpretation of hot plane strain compression testing of aluminium specimens. *Mater. Sci. Tech.*, 15 :295–300, 1999.
- [185] R.L. Stocker and M.F. Ashby. On the empirical constants in the Dorn equation. *Scripta Metall.*, 7 :115–120, 1973.
- [186] D. Stoyan, W.S. Kendall, and J. Mecke. *Stochastic geometry and its applications*. Wiley, 1995.
- [187] H.P. Stüwe. *Large deformation of crystalline aggregates*, chapter Experimental aspects of crystal plasticity, pages 1–20. Springer-Verlag, 1997.
- [188] P. Suquet. Small-contrast perturbation expansions for the effective properties of nonlinear composites. *C. R. Acad. Sci.*, 317 :1515–1522, 1993.
- [189] P. Suquet. Overall properties of nonlinear composites : a modified secant moduli theory and its link with ponte castañeda's nonlinear variational procedure. *C. R. Acad. Sci.*, 320 :563–571, 1995.
- [190] D.R.S. Talbot and J.R. Willis. Variational principles for inhomogeneous non linear media. *IMA J. Appl. Math.*, 35 :39–54, 1985.
- [191] D.R.S. Talbot and J.R. Willis. Some simple explicit bounds for the overall behaviour of nonlinear composites. *Int. J. Solids Structures*, 14/15 :1981–1987, 1992.
- [192] D.R.S. Talbot and J.R. Willis. Upper and lower bounds for the overall properties of a nonlinear composite dielectric. I. Random microgeometry. *Proc. Roy. Soc. A*, 447 :365–384, 1994.
- [193] D.R.S. Talbot and J.R. Willis. Bounds of third order for the overall response of nonlinear composites. *J. Mech. Phys. Solids*, 45 :87–111, 1997.
- [194] G.I. Taylor. Plastic strains in metals. *J. Inst. Metals*, 62 :307–324, 1938.
- [195] G.I. Taylor and C.F. Elam. The distortion of iron crystals. *Proc. Roy. Soc. A.*, 112 :337–361, 1927.
- [196] P. Thibaux. *Comportement mécanique d'un acier C-Mn microallié lors du laminage intercritique*. PhD thesis, Ecole des Mines de Paris, 2001.
- [197] J.C. Tolédano. Bases physiques des comportements mécaniques des solides. Cours de l'Ecole Polytechnique, PHY561, 2005.
- [198] C. Tomé, G.R. Canova, U.F. Kocks, N. Christodoulou, and J.J. Jonas. The relation between macroscopic and microscopic strain hardening in FCC polycrystals. *Acta Metall.*, 32 :1637–1653, 1984.

- [199] C. Tomé, P.J. Maudlin, R.A. Lebensohn, and G.C. Kaschner. Mechanical response of zirconium - I. Derivation of a polycrystal constitutive law and finite element analysis . *Acta Mater.*, 49 :3085–3096, 2001.
- [200] C.N. Tomé and R.A. Lebensohn. Manual for code Visco-Plastic-Self-Consistent (VPSC), version 6, 2003.
- [201] P. Van Houtte, L. Delannay, and S.R. Kalidindi. Comparison of two grain interaction models for polycrystal plasticity and deformation texture prediction. *Int. J. Plasticity*, 18 :359–377, 2002.
- [202] P. Van Houtte, L. Delannay, and I. Samajdar. Quantitative prediction of cold rolling texture in low-carbon steel by means of LAMEL model. *Textures Microstruc.*, 31 :109–149, 1999.
- [203] P. Van Houtte, S. Li, L. Delannay, and M. Seefeld. Deformation texture prediction : from the Taylor model to the Advanced LAMEL model. *Int. J. Plasticity*, 21 :589–624, 2005.
- [204] P. Van Houtte, S. Li, and O. Engler. Taylor-type homogenization methods for texture and anisotropy. In D. Raabe, F. Roters, F. Barlat, and L. Chen, editors, *Continuum scale simulation of engineering materials*, pages 459–472, 2004.
- [205] P. Vernusse. *Comportement mécanique d'un matériau microhétérogène. Application à la déformation à chaud d'aciers à deux phases ductiles*. PhD thesis, Institut National Polytechnique de Grenoble et Ecole Nationale Supérieure des Mines de Saint-Etienne, 1993.
- [206] E. Voce. The relationship between stress and strain for homogeneous deformation. *J. Inst. Metals*, 74 :537–562, 1948.
- [207] E. Voce. A practical strain-hardening function. *Metallurgia*, 51 :219–226, 1955.
- [208] L.J. Walpole. On the overall elastic moduli of composite materials. *J. Mech. Phys. Solids*, 17 :235–251, 1969.
- [209] J. Willis. Mechanics of composites. Cours de l'Ecole Polytechnique, Majeure 1, 2002.
- [210] J.R. Willis. Bounds and self-consistent estimates for the overall properties of anisotropic composites. *J. Mech. Phys. Solids*, 25 :185–202, 1977.
- [211] J.R. Willis. Variational and related methods for the overall properties of anisotropic composites. *Adv. Appl. Mech.*, 21 :160–242, 1981.
- [212] J.R. Willis. On methods for bounding the overall properties of nonlinear composites. *J. Mech. Phys. Solids*, 39 :73–86, 1991.
- [213] J.R. Willis. On methods for bounding the overall properties of nonlinear composites : correction and addition. *J. Mech. Phys. Solids*, 40 :441–445, 1992.
- [214] J.R. Willis. Upper and lower bounds for non-linear composite behaviour. *Mater. Sci. Eng. A*, 175 :7–14, 1994.
- [215] A. Zaoui. Matériaux hétérogènes et composites. Cours de l'Ecole Polytechnique, Majeure 1, 2000.
- [216] C. Zener and J.H. Hollomon. Effect of strain-rate upon the plastic flow of steel. *J. Appl. Phys.*, 15 :22, 1944.